

Technická univerzita v Liberci

**FAKULTA PŘÍRODOVĚDNĚ-HUMANITNÍ A PEDAGOGICKÁ**

**Katedra:** Chemie  
**Studijní program:** Specializace v pedagogice  
**Studijní obor:** AJ – CH

**VIZUALIZACE STRUKTURY  
ANORGANICKÝCH LÁTEK**  
**VISUALIZATION OF STRUCTURES  
OF INORGANIC COMPOUNDS**

**Bakalářská práce:** 11-FP-KCH-0002

**Autor:**

Michaela KUPCOVÁ

**Podpis:**

\_\_\_\_\_

**Vedoucí práce:** Ing. Jan Grégr

**Konzultant:** Mgr. Martin Slavík, Ph. D.

**Počet**

stran	grafů	obrázků	tabulek	pramenů	příloh
86	0	56	8	65	0

V Liberci dne: 14. 7. 2011

zadání - originál

## ČESTNÉ PROHLÁŠENÍ

**Název práce:** Vizualizace struktury anorganických látek  
**Jméno a příjmení autora:** Michaela Kupcová  
**Osobní číslo:** P09001096

Byl/a jsem seznámen/a s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon), ve znění pozdějších předpisů, zejména § 60 – školní dílo.

Prohlašuji, že má bakalářská práce je ve smyslu autorského zákona výhradně mým autorským dílem.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li bakalářskou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Bakalářskou práci jsem vypracoval/a samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

Prohlašuji, že jsem do informačního systému STAG vložil/a elektronickou verzi mé bakalářské práce, která je identická s tištěnou verzí předkládanou k obhajobě a uvedl/a jsem všechny systémem požadované informace pravdivě.

V Liberci dne: 14. 7. 2011

---

Michaela Kupcová

## **ANOTACE**

Bakalářská práce (BP) se zaměřuje na využití vizualizačních počítačových programů při studiu prostorového uspořádání anorganických krystalů. BP popisuje základní funkce a nabízí stručný návod k programu Atoms V6.3 a dalším volně dostupným programům pro vizualizaci vnitřní struktury krystalů. Pomocí daného softwaru řeší podobnosti a rozdíly prostorového uspořádání vnitřní stavby krystalů, a to konkrétně v případě polymorfie a izomorfie.

## **KLÍČOVÁ SLOVA**

Vizualizace, počítačové programy, anorganické látky, Atoms V6.3, polymorfie, izomorfie.

## **ANNOTATION**

The Bachelor's Thesis (BT) is focused on the use of molecular visualization software in study of the spatial arrangement of inorganic crystals. BT describes the main functions of an Atoms V6.3 program and offers a brief guide not only to it, but also to other free molecular visualization programs. This software is then used for dealing with similarities and differences in the spatial arrangement of atoms in inorganic compounds; specifically in the case of polymorphism and isomorphism.

## **KEY WORDS**

Visualization, molecular visualization software, inorganic compounds, Atoms V6.3, polymorphism, isomorphism.

# OBSAH

ČESTNÉ PROHLÁŠENÍ .....	3
ANOTACE .....	4
OBSAH .....	5
SEZNAM OBRÁZKŮ .....	7
SEZNAM TABULEK .....	9
SEZNAM ZKRATEK .....	10
ÚVOD .....	11
1 TEORETICKÁ ČÁST .....	12
1.1 Vizualizace ve výuce chemie .....	12
1.1.1 Vizualizace učiva .....	12
1.1.2 Obrazový materiál jako učební pomůcka ve výuce chemie .....	12
1.2 Grafické zobrazení minerálů .....	14
1.2.1 Možnosti vizualizace molekul .....	14
1.2.2 CIF formát .....	14
1.2.3 Americká mineralogická databáze .....	15
1.2.4 Mineralogická databáze Mindat .....	16
1.2.5 Další webové stránky se strukturami minerálů v angličtině .....	16
1.2.6 Webové stránky se strukturami minerálů v češtině .....	17
2 EXPERIMENTÁLNÍ (POPISNÁ) ČÁST .....	18
2.1 Chemické programy pro zobrazení anorganických struktur .....	18
2.1.1 Atoms V6.3 .....	18
2.1.2 CrystalMaker 2.3.5 demoverze .....	24
2.1.3 Mercury 2.3 .....	28
2.1.4 Jmol 12.0.39 .....	33
2.1.5 ViewerLite 5.0 .....	37

2.1.6	Diamond 3.2g .....	41
3	PRAKTICKÁ ČÁST .....	47
3.1	Polymorfie .....	47
3.1.1	Modifikace uhlíku (C) .....	47
3.1.2	Modifikace uhličitanu vápenatého ( $\text{CaCO}_3$ ) .....	50
3.1.3	Modifikace oxidu křemičitého ( $\text{SiO}_2$ ) .....	52
3.1.4	Modifikace oxidu titaničitého ( $\text{TiO}_2$ ) .....	54
3.2	Izomorfie .....	57
3.2.1	Izomorfní řada kalcitu .....	58
3.2.2	Izomorfní řada aragonitu .....	61
3.2.3	Spinelidy .....	64
3.2.4	Skalice se stejným počtem vod – řada starkeyitu .....	67
3.2.5	Skalice se stejným počtem vod – řada chalkantitu .....	70
3.2.6	Skalice se stejným počtem vod – řada hexahydritu .....	71
3.2.7	Tuttonovy soli .....	73
3.2.8	Skalice se stejným počtem vod – řada melanteritu .....	76
	ZÁVĚR .....	78
	SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY .....	80

## SEZNAM OBRÁZKŮ

Obr. 1: Získání a využití CIF formátu.....	17
Obr. 2: Ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ v demoverzi.....	19
Obr. 3: Ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ v plné verzi .....	19
Obr. 4: Atoms V6.3.....	20
Obr. 5: Ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ .....	24
Obr. 6: CrystalMaker demoverze .....	25
Obr. 7: Ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ .....	29
Obr. 8: Mercury .....	30
Obr. 9: Mercury – vstupní formáty s příponami .....	32
Obr. 10: Mercury – výstupní formáty s příponami .....	32
Obr. 11: Ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ .....	33
Obr. 12: Jmol .....	34
Obr. 13: Ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ .....	38
Obr. 14: ViewerLite .....	38
Obr. 15: ViewerLite – vstupní formáty s příponami .....	40
Obr. 16: ViewerLite – výstupní formáty s příponami.....	40
Obr. 17: Diamond – ukázka struktury $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$ .....	41
Obr. 18: Diamond .....	42
Obr. 19: Diamond – vstupní formáty s příponami.....	42
Obr. 20: Diamond – výstupní formáty s příponami.....	42
Obr. 21: Struktura grafitu – použita CIF data [10] .....	48
Obr. 22: Struktura diamantu – použita CIF data [12] .....	48
Obr. 23: Struktura lonsdaleitu – použita CIF data [14].....	49
Obr. 24: Struktura aragonitu – použita CIF data [16].....	50
Obr. 25: Struktura kalcitu – použita CIF data [18].....	51
Obr. 26: Kalcit – skluzové roviny.....	51
Obr. 27: Struktura křemene – použita CIF data [21] .....	52
Obr. 28: Struktura tridymitu – použita CIF data [23] .....	53
Obr. 29: Struktura cristobalitu – použita CIF data [25] .....	53
Obr. 31: Struktura rutilu – polyedry .....	55
Obr. 33: Struktura brookitu – polyedry.....	55

Obr. 34: Struktura anatasu – použita CIF data [31].....	56
Obr. 35: Struktura anatasu – polyedry .....	56
Obr. 36: Struktura magnesitu – použita CIF data [18].....	58
Obr. 37: Struktura sideritu – použita CIF data [18].....	59
Obr. 38: Struktura rodochrozitu – použita CIF data [18].....	60
Obr. 40: Struktura cerusitu – použita CIF data [39] .....	62
Obr. 41: Struktura stroncianitu – použita CIF data [16] .....	63
Obr. 42: Struktura spinelu – použita CIF data [42] .....	65
Obr. 43: Struktura spinelu v řezu.....	65
Obr. 44: Struktura magnetitu – použita CIF data [44] .....	66
Obr. 45: Polyedry $\text{FeO}_4$ a $\text{FeO}_6$ .....	66
Obr. 46: Struktura chromitu – použita CIF data [46].....	66
Obr. 47: Polyedry $\text{FeO}_4$ a $\text{CrO}_6$ .....	66
Obr. 48: Struktura starkeyitu – použita CIF data [48] .....	68
Obr. 50: Struktura chalkantitu – použita CIF data [53] .....	70
Obr. 51: Struktura hexahydritu – použita CIF data [57] .....	72
Obr. 52: Struktura mohritu – použita CIF data [61] .....	73
Obr. 53: Mohrit – polyedry .....	73
Obr. 54: Vzdálenosti ve struktuře .....	74
Obr. 55: Mohrit – skluzové roviny .....	74
Obr. 56: Struktura melanteritu [65] .....	77



## SEZNAM TABULEK

Tab. 1: Izomorfní řada kalcitu .....	61
Tab. 2: Izomorfní řada aragonitu .....	64
Tab. 3: Spinelidy.....	67
Tab. 4: Skalice se stejným počtem vod – řada starkeyitu .....	69
Tab. 5: Skalice se stejným počtem vod – řada chalkantitu .....	71
Tab. 6: Skalice se stejným počtem vod – řada hexahydritu .....	73
Tab. 7: Tuttonovy soli .....	76
Tab. 8: Skalice se stejným počtem vod – řada melanteritu.....	77

## SEZNAM ZKRATEK

Značka	Rozměr	Význam
a	[m]	rozměr elementární buňky
b	[m]	rozměr elementární buňky
c	[m]	rozměr elementární buňky
$M_r$	[kg. mol <sup>-1</sup> ]	molární hmotnost
V	[m <sup>3</sup> ]	objem
$\rho$	[kg. m <sup>3</sup> ]	hustota

Poznámka: V bakalářské práci se také objevují jednotky Å (odpovídá  $1 \times 10^{-10}$  m) pro délku a Å<sup>3</sup> pro objem, které nepatří mezi jednotky SI. Běžně se ovšem používají v přírodních vědách pro vyjádření velikosti atomů, molekul či délky vazeb a často jsou primárně užívány v programech pro vizualizaci struktur krystalů. Z tohoto důvodu jsou v některých případech v práci zachovány.

## ÚVOD

Pokrok nelze zastavit. Tento fakt je jasný každému z nás, ale kolik lidí je ochotno se skutečně této pravdě přizpůsobit a začít na věci pohlížet novým revolučním způsobem? Chemie je věda, která neustále překonává své hranice a je zároveň pojmem tak širokým, že je nutností hledat nové způsoby umožňující její lepší pochopení. Některá odvětví chemie jsou pro lidskou představivost natolik abstraktní, že si je lze bez názorné ukázky jen těžko představit. A právě to je důvodem, proč jsem se rozhodla zabývat vizualizací struktury anorganických látek. S tím samozřejmě úzce souvisí i znalost a prostudování programů, které tuto vizualizaci umožňují.

Cíle práce jsou celkem dva. Prvním cílem je prostudování programu Atoms V6.3 a dalších programů pro vizualizaci vnitřní struktury krystalů – jmenovitě to jsou CrystalMaker 2.3.5 demoverze, Mercury 2.3, Jmol 12.0.39, ViewerLite 5.0 a Diamond 3.2g. V případě Atoms V6.3 se jedná o placenou verzi, ostatní programy jsou volně dostupné. Pokud je již podobný software využíván, často slouží pouze k zobrazování organických struktur. Ráda bych, aby bylo dokázáno, že daný software může být i velmi dobře využit pro potřeby anorganické chemie a zkoumání struktury krystalů. Zároveň by tato bakalářská práce měla ke každému programu nabídnout stručný přehled jeho funkcí a návod pro jeho stažení z internetu.

Druhým cílem je uplatnění těchto programů pro studium a objasňování vnitřní struktury anorganických látek – konkrétně se jedná o změny ve vnitřní stavbě v souvislosti s polymorfií a izomorfií. Teoretické načtení, co který jev znamená, je sice prvním klíčem k jeho pochopení, ale tato práce by měla poskytnout konkrétní data a obrázky znázorňující jak která struktura přesně vypadá a k jakým změnám, např. u délky vazeb či spojení s dalšími atomy, uvnitř dochází.

Chemické vzorce mohou být na papíře jasné a srozumitelné, ovšem to, jak který krystal opravdu reálně vypadá nám často prozradí jen velmi matně. A právě tento problém řeší vizualizace, která umožňuje nahlédnout do stavby krystalu z mnoha úhlů pohledu a nabízí vhodné nástroje pro jeho zkoumání.

# 1 TEORETICKÁ ČÁST

## 1.1 Vizualizace ve výuce chemie

### 1.1.1 Vizualizace učiva

Jak tvrdí [1], pojem **vizualizace** má svůj původ v latinském slově *vider* – viděti. Vizualizace je tedy operace, která transformuje strukturu či charakteristické vlastnosti do podoby umožňující jejich zrakové vnímání. Je to tedy činnost, kterou daný jev zviditelňujeme.

**Vizualizaci učiva** můžeme definovat jako grafické vyjádření pojmů a vztahů mezi nimi, které žákům usnadňuje pochopení látky. Vizualizace je podmínkou pro tzv. **vizuální učení**, které představuje individuální styl učení žáka založený na nonverbálním způsobu sdělování informací. K tomuto účelu slouží např. obrazový materiál.

**Obrazový materiál** jakožto učení z obrázků, schémat či grafů je využíván k výukovým účelům od pradávna. Již Aristoteles používal ilustrace při výkladu anatomie, Platon jako pomůcku v geometrii a Jan Ámos Komenský ve svém světoznámém díle *Orbis Pictus*, kde jsou elementy živé a neživé přírody popisovány nejen slovy, ale i obrazovými prostředky. Dnes využíváme informačních a komunikačních technologií (ICT), které jsou nedílnou součástí každodenního života. Otevírají nám nové možnosti v podobě interaktivního učení a snadno dostupných informací. Díky speciálním počítačovým programům můžeme vytvářet modely, které žákům umožňují nahlédnout do vnitřní struktury látek a vést tak k porozumění jejich vlastností a chování.

### 1.1.2 Obrazový materiál jako učební pomůcka ve výuce chemie

Mezi obrazové pomůcky patří ty, které předmět výuky vyjadřují dvojrozměrně v souvislé ploše.

**Zobrazení skutečná** jsou prvním typem. Nejvěrnější zobrazení skutečnosti představuje fotografie (např. fotografie chemické aparatury). Její nevýhodou ovšem je, že může obsahovat příliš nepodstatných či detailních informací, které mohou

zkomplikovat porozumění. V chemii se jeví jako nejefektivnější zobrazení pomocí kreslených obrazů (např. schéma složení atomu či tabulka s vlastnostmi látek). Ty jsou sice jednoduché a přehledné, ale vyžadují symbolizaci. Symbolizace neboli vyjadřování pomocí symbolů hraje v chemii důležitou roli. Jedním z jejích cílů je překonání jazykových bariér a učinit tak jevy v chemii mezinárodně srozumitelné. Symbolika se konkrétně používá při znázornění chemických značek, vzorců, rovnic či reakčních schémat.

**Zobrazení promítaná (zprostředkovaná)** jsou druhým typem. Jsou charakterizována možnostmi velkého zvětšení, rychlé záměny obrazu a díky světlu zvýrazňujícímu projekci nabízí možnosti výraznějšího působení na pozornost žáků. Pomůcky řazené k promítaným zobrazením dále dělíme na statické (např. přírodnina jakožto statický objekt promítaná pomocí videokamery/vizualizéru) a dynamické (např. film či počítačová animace promítaná pomocí vizualizéru).

Skutečná zobrazení v chemii (např. modely molekul sestavené ze stavebnice) jsou dnes nahrazována zobrazeními promítanými. Aktuální přínos představuje počítačová podpora tvorby modelů objektů a jevů. Sem patří grafické modely a modely molekul [1].

## 1.2 Grafické zobrazení minerálů

### 1.2.1 Možnosti vizualizace molekul

Výuka chemie nabízí dostatečný prostor pro specifické využití didaktických pomůcek a prostředků. Jednou z nich je bezesporu vizualizace struktur a reaktivity sloučenin, zvláště pak bavíme-li se o organické chemii. Na školách se ale učí nejen chemie organická, ale i chemie anorganická, pro kterou je tvoření modelů stejně důležité. Jedním z témat je i studium chemické struktury krystalických látek, kde se jeví využití ICT jako velmi vhodné. Modely vytvořené pomocí počítačových programů pomáhají žákům prozkoumat vnitřní strukturu těchto látek a pochopit jejich vlastnosti a chování. Na internetu je k nalezení několik programů pro vytváření modelů krystalů, mnoho z nich i v bezplatné demoverzi. Tyto programy lze využít buď pro vytváření nových struktur dle požadavků uživatele, nebo pro vložení tzv. CIF dat a následné úpravě struktur.

### 1.2.2 CIF formát

CIF neboli Crystallography Information File je obecný, flexibilní a volně dostupný formát archivního souboru, který je srozumitelný lidskému i strojovému vidění a může být editován pomocí jednoduchého textového editoru. Primárně je určen pro elektronický přenos krystalografických dat mezi laboratořemi, vydavateli odborných časopisů či různými databázemi. Tento formát byl schválen a doporučen Mezinárodní unií krystalografie (International Union of Crystallography) jako standardní médium pro tyto účely.

Struktura CIF souboru je jednoduchá. Každý soubor obsahuje sekvenci datových bloků, které jsou jednoznačně pojmenovány. Patří sem název struktury, jméno autora, informace o publikaci, ve kterém byl poprvé uveden, parametry buňky, symetrie a seznam prvků. Každý takový datový blok obsahuje posloupnost jednotlivých datových položek. Pro zefektivnění mohou být opakující se datové položky umístěny do jednoduché datové smyčky.

Datové bloky a jejich přesné definice, které jsou řazeny hierarchicky podle datových kategorií, tvoří seznam - tzv. CIF Slovník (CIF Core Dictionary). Tento slovník pokrývá základní a nejčastěji používané datové položky týkající se krystalové

strukturní analýzy. Slovník je dostupný v elektronické podobě a je vhodný pro počítačové aplikace. Budoucí a rozšířené verze Slovníku budou také obsahovat datové položky používané ve specifitějších odvětvích krystalografie [2].

### **1.2.3 Americká mineralogická databáze**

Americká mineralogická databáze (The American Mineralogist Crystal Structure Database) je vyvíjena pro archivování údajů o každé krystalové struktuře a slouží tedy jako největší sbírka strukturních dat minerálů. Je využívána hlavně mineralogy a geology, kteří si informace mohou stáhnout ve výše zmíněném CIF formátu. Obsahuje všechny krystalové struktury vydané v časopisech Americký mineralog (American Mineralogist) a Kanadský mineralog (The Canadian Mineralogist). Krystalové struktury z Evropského časopisu o mineralogii (The European Journal of Mineralogy) jsou v současné době přidávány do databáze. Vydavatelé časopisu Acta Crystallographica a Springer-Verlag právě uzavřeli dohodu, že i jejich mineralogické údaje budou taktéž přidány do databáze. Databáze v současné době obsahuje kolem 8000 údajů o zhruba 7000 krystalech [3].

Databáze je financována z prostředků Národní vědecké nadace (National Science Foundation) a udržována díky úsilí Americké mineralogické společnosti (Mineralogical Society of America) a Kanadské mineralogické společnosti (Mineralogical Association of Canada) [4].

Informace databáze jsou přístupné prostřednictvím internetu na webové adrese [rruff.geo.arizona.edu/AMS](http://rruff.geo.arizona.edu/AMS). Data o struktuře krystalu lze vyhledat několika způsoby, a to zadáním:

- názvu minerálu,
- jména autora, který publikoval údaje o krystalu,
- jednotlivých prvků, které minerál obsahuje,
- parametrů buňky a symetrie,
- údajů o difrakci.

Data se dají snadno stáhnout v CIF formátu a následně otevřít v některém vizualizačním programu.

### 1.2.4 Mineralogická databáze Mindat

Tato databáze se řadí mezi největší mineralogické databáze na internetu. Nalezneme ji na adrese [www.mindat.org](http://www.mindat.org). Je vhodná jak pro nováčky, kteří se chtějí dozvědět základní informace o minerálech, tak i pro profesionály. Stránka obsahuje data sesbíraná ze všech koutů světa. Krom základních vlastností a popisu minerálů nabízí i seznam lokalit a spoustu fotografií.

Vyhledávat minerály lze podle:

- názvu,
- lokality,
- fyzikálních vlastností,
- prvků, ze kterých se minerál skládá.

Databáze nabízí vyčerpávající soupis informací o hledaném minerálu. Krom fyzikálních, krystalografických, optických a chemických vlastností tu najdeme i název přeložený do několika jazyků, Jmol applet se strukturou minerálu, kontakt na prodejce daného minerálu, mapku světa se zvýrazněnými lokalitami a externí odkazy. Ty nás dovedou na stránky Wikipedie, různých mineralogických atlasů nebo nás odkážou na Americkou mineralogickou databázi, kde si můžeme stáhnout jeho CIF data.

Mindat má ještě sekci otázek a odpovědí, kam může kdokoli směřovat svůj dotaz a počkat si na vyjádření. Je tu i sekce, která umožňuje přímé chatování mezi registrovanými uživateli. Co víc, pro zájemce je tu i online aukce minerálů.

### 1.2.5 Další webové stránky se strukturami minerálů v angličtině

[webmineral.com](http://webmineral.com)

Databáze obsahuje přehled krystalových soustav doplněných obrázky. Dále abecední seznam přibližně pěti tisíc minerálů, jejich fotografií a Jmol appletů, kde si můžeme strukturu detailně prohlédnout.

[ruby.colorado.edu/~smyth/min/minerals.html](http://ruby.colorado.edu/~smyth/min/minerals.html)

Stránky jsou ve výstavbě. Obsahují ukázky struktur a základní popis vybraných minerálů.



[www.minweb.co.uk/Mineral\\_Web.html](http://www.minweb.co.uk/Mineral_Web.html)

Stránky slouží k zobrazování 3D struktur minerálů. Pro správné fungování je vyžadováno stažení plug-inu, který je volně dostupný na internetu. Se strukturou se dá otáčet, přibližovat ji a identifikovat jednotlivé atomy. Každý minerál obsahuje i krátký popis s vlastnostmi.

[en.wikipedia.org/wiki/List\\_of\\_minerals\\_\(complete\)](http://en.wikipedia.org/wiki/List_of_minerals_(complete))

Minerály jsou rozděleny do skupin dle abecedy. Po výběru konkrétního minerálu se zobrazí základní popis a externí odkazy, které často obsahují obrázek struktury.

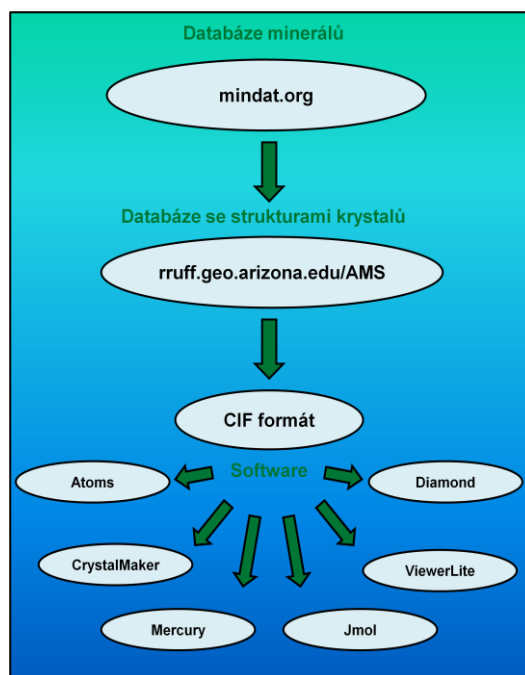
### 1.2.6 Webové stránky se strukturami minerálů v češtině

[cs.wikipedia.org/wiki/Kategorie:Minerály](http://cs.wikipedia.org/wiki/Kategorie:Minerály)

Stránka obsahuje abecední seznam minerálů. V jednotlivých článcích je základní popis minerálu, jeho fotografie a v některých případech rovnou i struktura. Pokud tomu tak není, pak je v externích odkazech uvedena zahraniční databáze, jako například Mindat.

[www.xray.cz/krystalografie/str08a.htm](http://www.xray.cz/krystalografie/str08a.htm)

Zde nalezneme přehled základních typů krystalových struktur a ukázkou několika animací.



Obr. 1: Získání a využití CIF formátu

## 2 EXPERIMENTÁLNÍ (POPISNÁ) ČÁST

### 2.1 Chemické programy pro zobrazení anorganických struktur

V současné době již existuje mnoho vizualizačních programů, jejichž cílem je zobrazení nejrůznějších chemických struktur. Tyto programy jsou využívány nejen pro vědecké účely, ale i ve školách pro výuku chemie. Jejich popularita je patrná hlavně v organické chemii, o čemž svědčí velké množství vydané literatury, sloužící jako návod pro použití v tomto odvětví.

Vizualizace anorganických struktur v jistém slova smyslu „pokulhává“, i když jsou její výhody více než zřejmé. Dvojdimenzionální zobrazení krystalů je vzhledem ke složité vnitřní struktuře naprosto nedostatečné. Představme si například modrou skalici. 2D zobrazení nám nedá ani zdaleka nahlédnout do tajů vnitřního uspořádání, ze kterého bychom byli schopni vyvodit jasné závěry. A to je přesně ta chvíle, kdy nastupuje pomoc v podobě vizualizačních programů. Ty nám umožňují strukturu zobrazit „v celé své kráse“ včetně přiblížení, barevného zvýraznění jednotlivých atomů, rotování, měření délky vazeb a velikosti úhlů a tak dále. Jednotlivé programy se ve svých schopnostech pochopitelně liší, ale o tom již více na následujících stránkách.

Práce s počítačem by neměla žádného moderního pedagoga děsit a už vůbec by se jí neměl vyhýbat. Pro dnešní žáky je PC a jeho ovládání naprosto přirozenou součástí každodenního života. Použití počítače či v lepším případě počítačové učebny shledávám jako velmi přínosné hlavně z toho důvodu, že zpestří vyučování a vysvětlí problematiku vnitřního uspořádání atomů v krystalech názornou a jasnou formou.

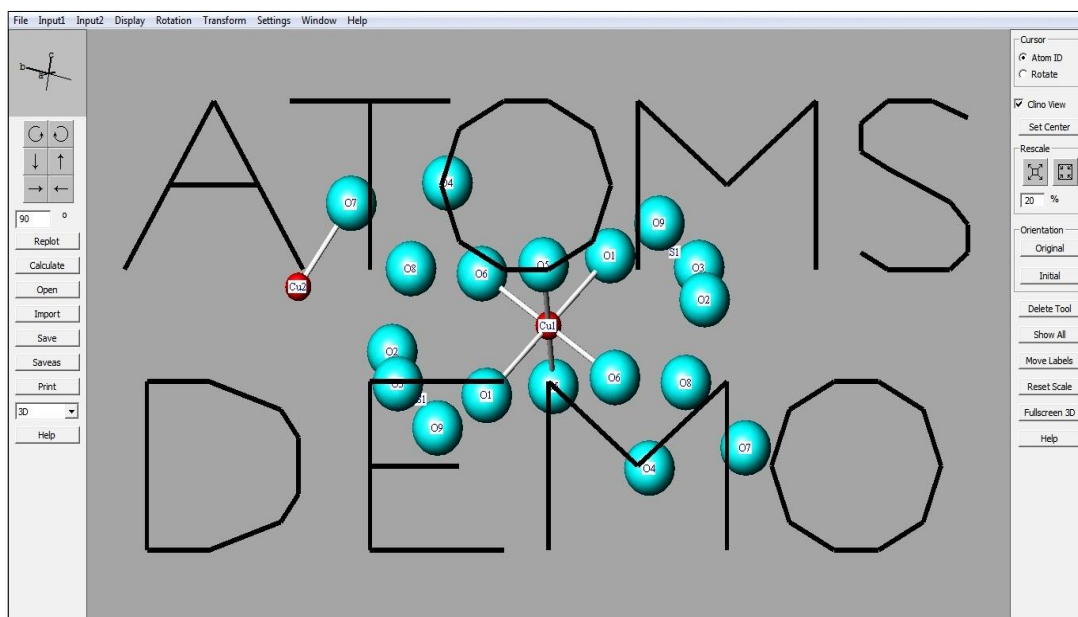
V následujících podkapitolách se zaměřuji na popis programů Atoms, CrystalMaker, Mercury, Jmol, ViewerLite a Diamond.

#### 2.1.1 Atoms V6.3

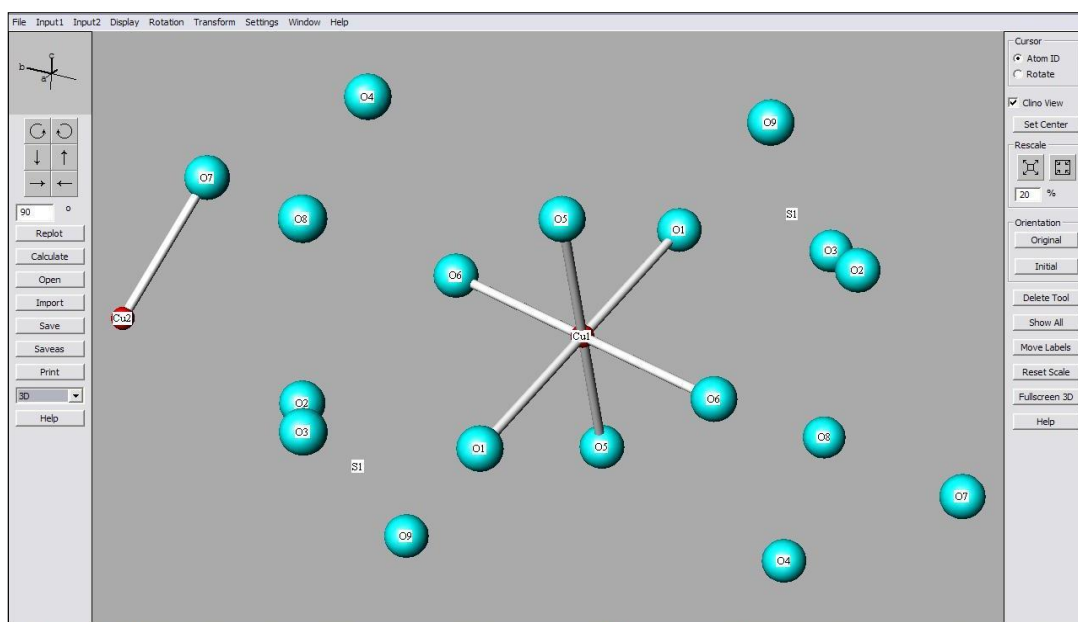
##### Získání softwaru:

Demoverze i zde popisovaná placená verze programu je k dostání na webových stránkách společnosti Shape Software na adrese [www.shapesoftware.com/](http://www.shapesoftware.com/).

Zde najdeme kompletní nabídku produktů této společnosti včetně popisů programů, ukázky obrázků a přímého odkazu pro stažení bezplatné demoverze, který se nachází na konci stránky. Pro placenou verzi je nutné uhradit finanční částku a dle vybraného způsobu doručení počkat na balík či na zaslání aktivačního klíče na e-mail, který se vloží během instalace do demoverze programu.



Obr. 2: Ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$  v demoverzi

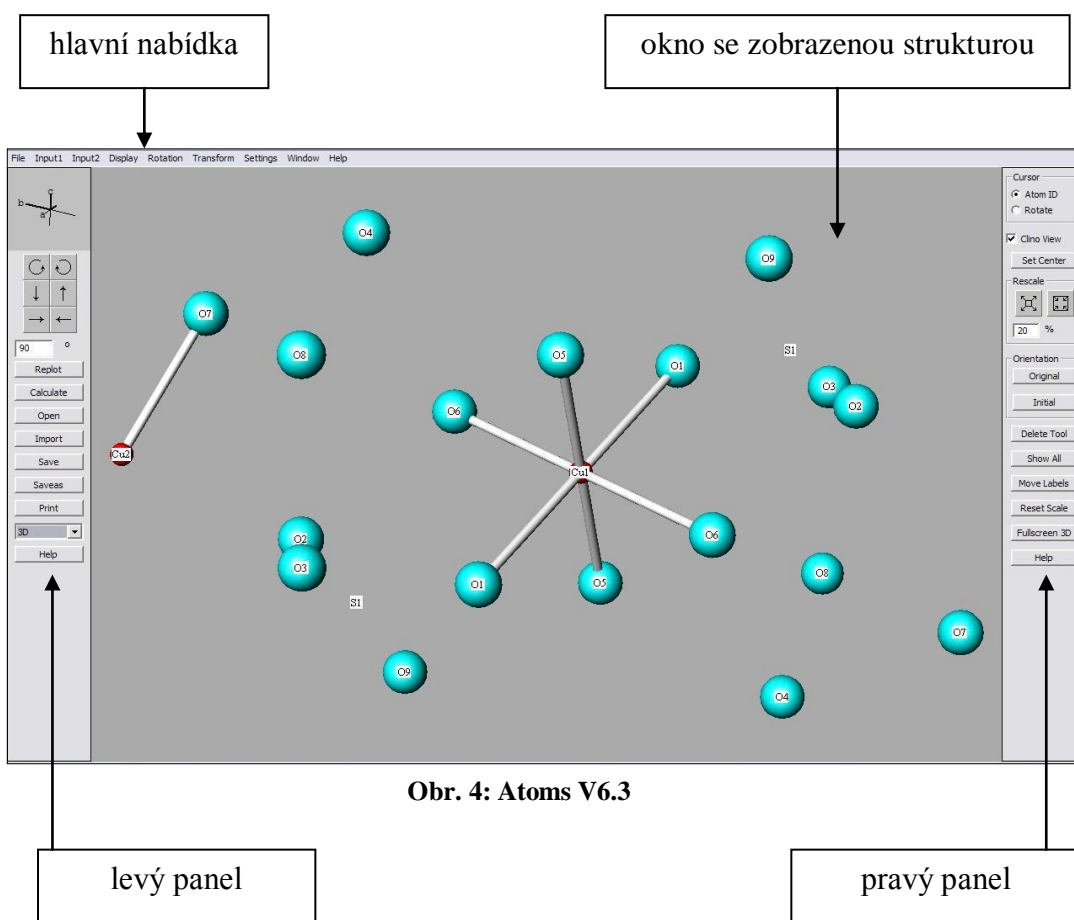


Obr. 3: Ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$  v plné verzi

### Systémové požadavky:

Tento 32-bitový program vyžaduje operační systém Microsoft Windows NT/2000/XP/Vista nebo Microsoft Windows 95/98/ME/7 a 11 MB volného místa na disku.

### Základní orientace v programu:



Obr. 4: Atoms V6.3

### *Hlavní nabídka:*

File Input1 Input2 Display Rotation Transform Settings Window Help

### Tlačítka:

File: Umožňuje například vytvoření nového souboru, otevření již vytvořeného souboru v programu Atoms, import dat ve formě vstupního formátu, uložení struktury, tisk či ukončení programu.

Input1: Umožňuje vytvořit popisek, změnit nastavení os, změnit barvu, velikost a povrch jednotlivých atomů či změnit barvu a tloušťku vazeb.

Input2: Nabídka slouží hlavně ke grafickým úpravám struktury. Lze změnit tloušťku ohraničení vazeb a atomů, tloušťku elementární buňky, její zobrazení/skrytí, stínování modelu, barvu pozadí nebo zobrazení os.

Display: Volba stylů zobrazení (dráty, 3D zobrazení atd.), možnost zobrazení modelu pouze černobíle, zobrazení popisků atomů, práškového diagramu nebo zobrazení/skrytí pravého a levého panelu.

Rotation: Různé možnosti otáčení. Lze i vytvořit záznam rotující struktury ve formátu AVI.

Transform: Odstraní například symetrii krystalu.

Settings: Zde například nastavení jednotek či nastavení barev pomocí palety.

Window: Obsahuje příkazy k zobrazení nebo aktivaci různých typů oken.

Help: Zobrazí nápovědu k programu.

*Levý panel:*



Náhled os struktury

Otáčení struktury o zadaný počet stupňů

Překreslení při změně parametrů

Přepočet změny parametrů

Otevření již vytvořeného souboru v programu Atoms

Import dat ve formě vstupního formátu

Uložení

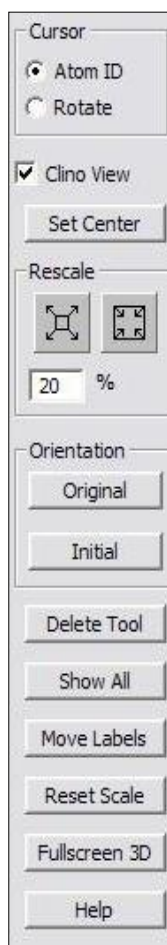
Uložení jako

Tisk

Volba stylů zobrazení

Nápověda

*Pravý panel:*



Při zatrhnutém *Atom ID* se kliknutím pravého tlačítka na atom zobrazí jeho vlastnosti. Při zatrhnutém *Rotate* se strukturou pouze otáčí.

Nastavení středu

Zvětšení/zmenšení struktury o zadaný počet stupňů

Původní/počáteční orientace

Mazání atomů

Zobrazení atomů

Přesunutí popisků

Smazání měřítka a centrování

3D náhled na celou obrazovku

Nápověda

#### Podporované vstupní formáty:

Program Atoms podporuje celkem 23 vstupních formátů [5]. Jmenovitě to jsou například: CIF, CCDC FDAT, AM MINERAL, PDB, IZA zeolites, či ICSD.

Stručné vysvětlení vybraných formátů:

**CIF** – viz. podkapitola CIF formát

**CCDC FDAT** – soubory Cambridgeského krystalografického datového centra (Cambridge Crystallographic Data Centre)

**AM MINERAL** – datové soubory z Americké mineralogické databáze (American Mineralogist Crystal Structure Database)

**PDB** – soubory z Proteinové databanky (Protein Data Bank) - informace o struktuře proteinů nebo nukleových kyselin

**IZA zeolites** – soubory Mezinárodní zeolitové asociace (International Zeolite Association)

**ICSD** – soubory z Databáze anorganických krystalových struktur (Inorganic Crystal Structure Database)

Podporované výstupní formáty:

STR – Struplo formát (struplo crystal data file)

Tento formát je zároveň vstupním pro program CrystalMaker, kde s ním můžeme dále pracovat.

Shrnutí – výhody programu:

- Společně s programem se stáhne přehledný průvodce v anglickém jazyce.
- Společně s programem se stáhne i databáze více než 40 ukázkových struktur.
- V programu lze tvořit vlastní struktury.
- Program nezabírá mnoho místa na disku.

Shrnutí – nevýhody programu:

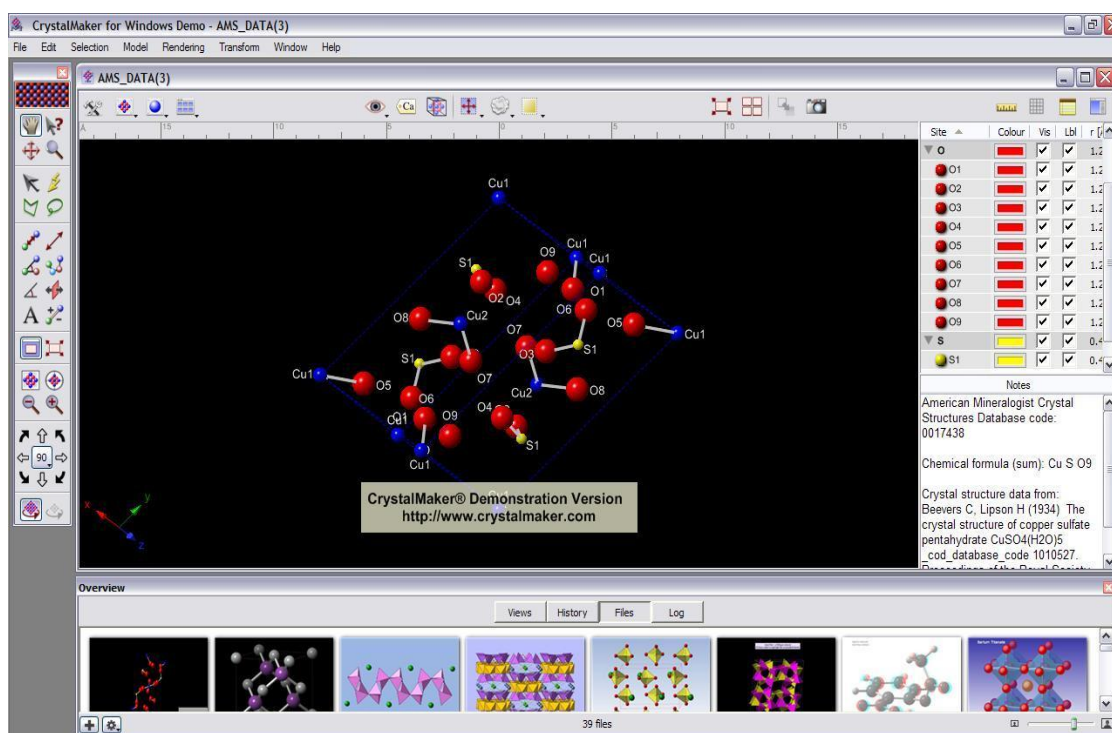
- Program se zdá v porovnání s následujícími programy celkem nepřehledný.
- Práce s programem je poměrně složitá, je vhodný spíše pro profesionály.
- Jednoduché funkce se musí složitě hledat, ovládání není intuitivní (například změna barvy atomu: Input1→Atoms→Revise→zde nastavení barvy, povrchu či velikosti). Nebo měření vzdálenosti mezi atomy (po kliknutí na první atom pravým tlačítkem se zobrazí tabulka s vlastnostmi→stejně klikneme i na druhý atom a dole v tabulce si všimneme poznámky o vzdálenosti tohoto atomu s předchozím atomem). Obdobně určíme i velikost úhlů.

## 2.1.2 CrystalMaker 2.3.5 demoverze

### Získání softwaru:

Všechny informace o produktech společnosti Crystal Maker Software Limited lze získat na internetové adrese [www.crystallmaker.com](http://www.crystallmaker.com).

Na hlavní stránce je třeba vybrat položku *Crystal and Molecular Structures Visualization & Diffraction*. Na následující stránce stiskneme u produktu CrystalMaker tlačítko *download*, poté si vybereme verzi pro Windows a spustíme samotnou instalaci.



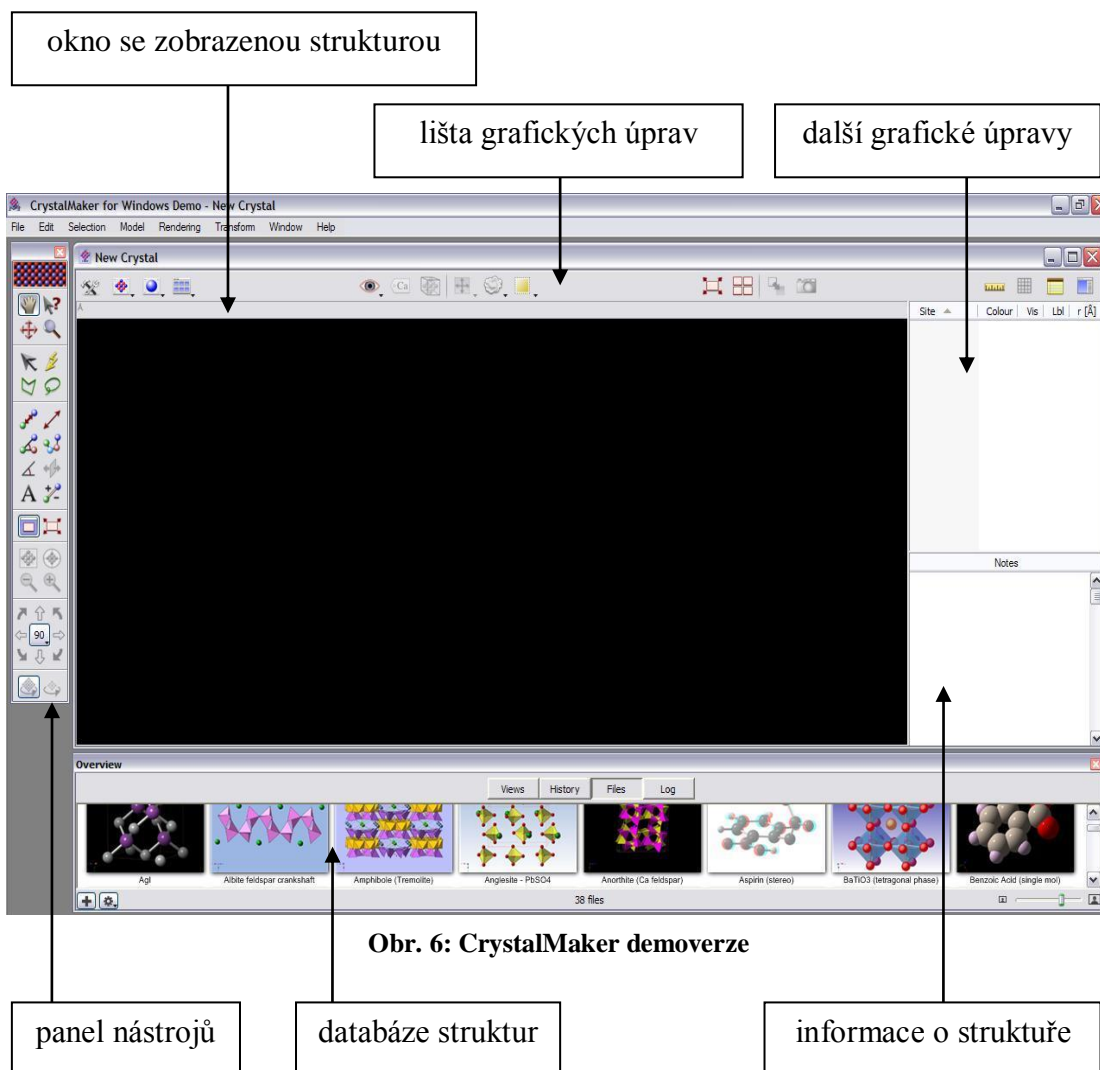
Obr. 5: Ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$

### Systémové požadavky:

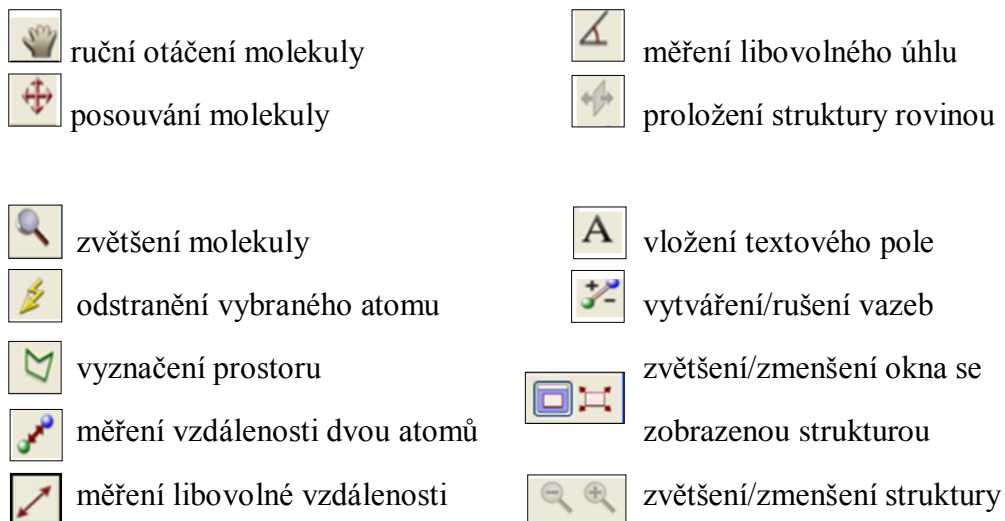
CrystalMaker pro operační systém Windows je poskytován v podobě komprimovaného instalačního balíčku s možností autorunu (automatického spuštění). Instalátor automaticky rozbalí všechny komponenty a zkopíruje je na příslušné místo pevného disku. Program vyžaduje operační systém Microsoft Windows XP/Vista/7 a 31 MB volného místa na disku.



## Základní orientace v programu:



## *Panel nástrojů:*





měření velikosti úhlů



měření úhlu roviny



otáčení strukturou o 90 °

### *Lišta grafických úprav:*



zobrazení/odebrání panelu nástrojů



po rozkliknutí obsahuje několik záložek:

- Atom – umožňuje předvolit zobrazení, velikost, sféru a tvar atomů v prostoru.
- Vazba – výběr z různých stylů, barev a velikostí vazeb.
- Povrch – lze vybrat barvu, typ a průhlednost povrchu.
- Konstrukce buněk – výběr stylu, šířky a barvy.
- Popisky – výběr typu, písma a možností zobrazení popisků.
- Pozadí – výběr z různých barev pozadí, možnost vložení obrázku.



vyobrazení atomu – opět nabídka několika záložek, uvádím například:

- Odrazivost – platí nejen pro atomy, ale i například pro vazby. Upravuje se vzhled, stínování, typ osvětlení.
- Osvětlení – změna intenzity či dopadu světla.



zobrazí/skryje databázi struktur



umožňuje náhled struktury podle os x, y, z



zobrazí/skryje popisky atomů



zobrazí/skryje buňku



umožňuje například přidat molekuly, vybrat jen některé atomy a vazby



umožňuje výběr molekul



zapne zobrazení struktury na celou obrazovku



umožní pracovat ve více oknech najednou



vyfotí aktuální náhled struktury



zobrazí/skryje pravítko nad strukturou



zobrazí/skryje síť pod strukturou





zobrazí/skryje panel s informacemi o struktuře



zobrazí/skryje celý pravý panel

#### *Okno se zobrazenou strukturou:*

V tomto okně můžeme pozorovat vybranou strukturu. Po stisknutí pravého tlačítka myši se objeví nabídka, kterou můžeme vyvolat nápovědu programu, vytvořit kopii okna se strukturou, vyfotit si strukturu či upravit vzhled celé struktury díky výše zmíněným nabídkám grafických úprav  a  .

#### *Další grafické úpravy:*

Můžeme měnit barvu, popisky a velikost jednotlivých atomů. Vybrané atomy můžeme také skrýt.

#### *Informace o struktuře:*

Podává informace o původu CIF formátu.

#### *Databáze struktur:*

Slouží jako prezentace grafických možností programu. V databázi je 39 struktur, které se dají nejen prohlížet, ale i upravovat.

#### Podporované vstupní formáty:

Program CrystalMaker podporuje celkem 18 vstupních formátů při zakoupení plné verze a 15 u demoverze. Jmenovitě to jsou například: C3D1/C3D2, CMDF, CMTX, FDAT, MACMOL a výše zmiňované CIF, Struplo či PDB.

#### *Stručné vysvětlení vybraných formátů:*

**C3D1/C3D2** – Chem3D Cartesian 1/2 chemical modeller input soubor

**CMDF** – Crystal Maker soubor

**CMTX** – Crystal Maker text

**FDAT** – soubor z Cambridgeské strukturní databáze (Cambridge Structure Database)

**MACMOL** – Mac Molecule soubor

#### Podporované výstupní formáty:

Program podporuje celkem 9 formátů u zakoupené verze, jmenovitě to jsou: C3D1/C3D2, CIF, CMFD, CMMF, CMTX, HTML, MACMOL a XYZ. Většina z nich slouží i jako vstupní formát.

U demoverze není podporován žádný výstupní formát.

#### Shrnutí – výhody programu:

- Krom otvírání souborů například v CIF formátu nabízí program i možnost vytvoření vlastních krystalů a atomů struktury dle zadaných parametrů a vlastního nastavení.
- Demoverze disponuje širokou škálou nejrůznějších grafických úprav krystalů, které činí vnitřní stavbu struktury velmi přehlednou.
- Ovládání programu je velmi intuitivní a přehledné. Orientace je snadná i pro začátečníka.
- Při instalaci demoverze se automaticky stáhne i šikovný průvodce programem.
- Program nabízí funkce nejen pro začátečníky v oblasti vizualizace struktur, ale nabízí i rozšířené ovládání pro profesionály.

#### Shrnutí – nevýhody programu:

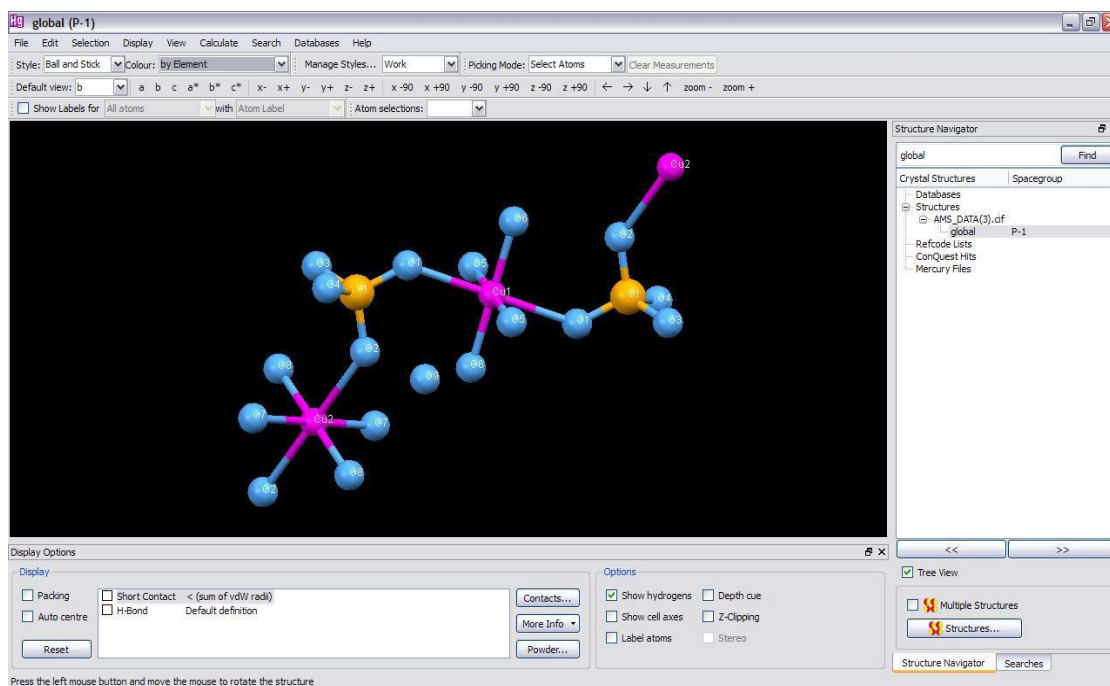
- Nevýhoda demoverze spočívá ve výrazném omezení některých funkcí. Například ve zredukovaném množství vstupních a výstupních formátů.
- Výslednou strukturu nelze uložit.

### **2.1.3 Mercury 2.3**

#### Získání softwaru:

Všechny informace o společnosti Cambridge Crystallographic Data Centre (CCDC) lze získat na internetové adrese [www.ccdc.cam.ac.uk](http://www.ccdc.cam.ac.uk).

Na webové stránce [www.ccdc.cam.ac.uk/free\\_services/mercury/downloads/](http://www.ccdc.cam.ac.uk/free_services/mercury/downloads/) vybereme první položku s názvem *Mercury 2.3*. Na následující stránce přečteme podmínky užívání programu a stiskneme tlačítko *Accept*. Poté vybereme verzi určenou pro operační systém Windows a spustíme samotnou instalaci.




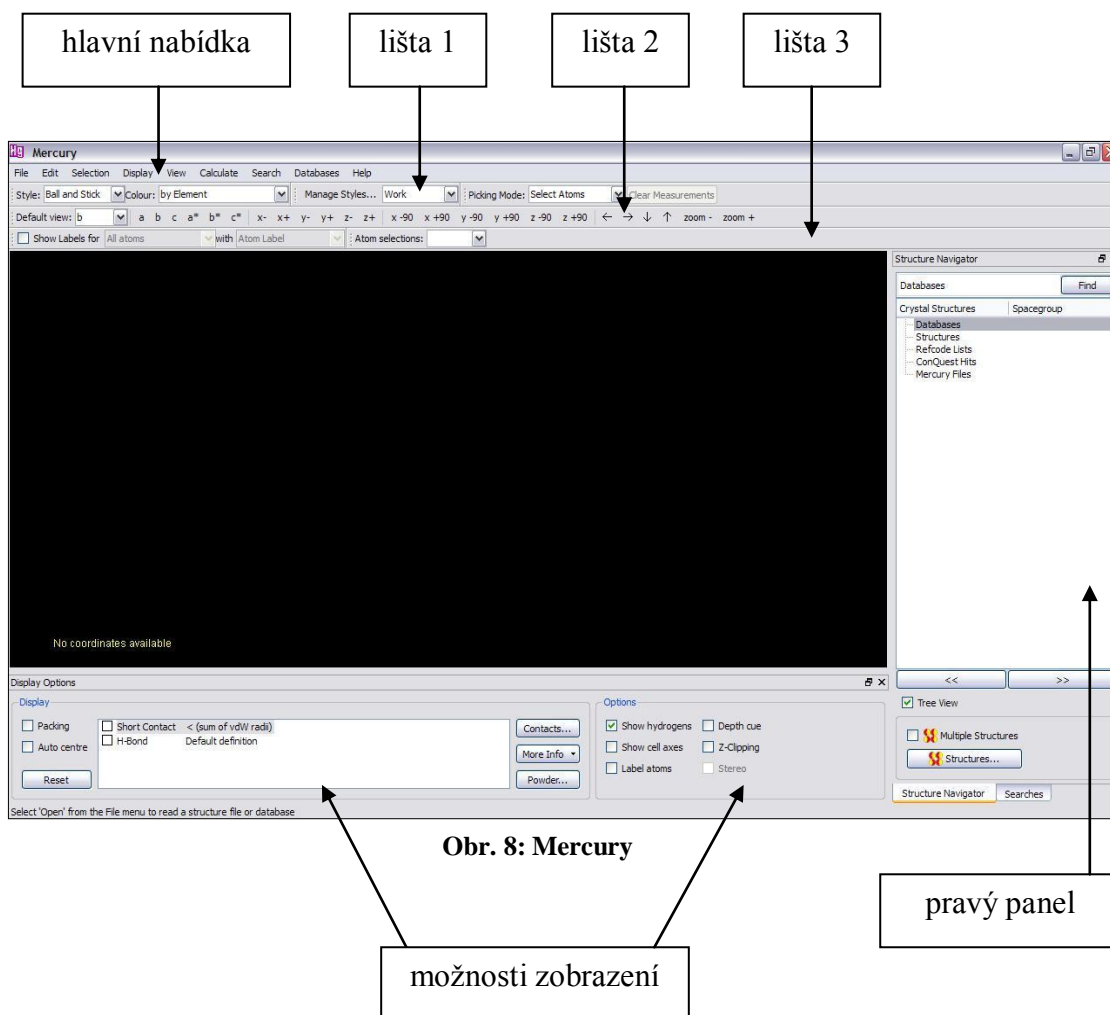
Obr. 7: Ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$

### Systémové požadavky:

Tento volně dostupný software určený nejen pro Windows vyžaduje v našem případě operační systém Microsoft Windows XP/Vista/7 a 138 MB volného místa na disku.

### Základní orientace v programu:

Volně dostupná verze programu obsahuje pro neregistrované uživatele určitá omezení. Ta jsou označena ikonkou .



### Hlavní nabídka:

File	Edit	Selection	Display	View	Calculate	Search	Databases	Help
------	------	-----------	---------	------	-----------	--------	-----------	------

### Tlačítka:

**File:** Umožňuje otevřít vstupní soubory, uložit strukturu ve výstupním formátu a uzavřít celý program.

**Edit:** Většina tlačítek je pro neregistrovaného uživatele nepřístupných. Umožňuje jít o krok zpět či kopírovat snímek.

**Selection:** Možnost výběru atomů, molekul, obráceného/rozšířeného výběru.

**Display:** Volba stylů zobrazení (dráty, tyčinky, kaloty, elipsoidy apod.), popisků a barev. Zobrazí seznam s informacemi například o atomech, vazbách, úhlech nebo vzdálenostech ve struktuře.

View: Znázorní modely ve směru krystalografických os, nabízí výběr zobrazení/odebrání jednotlivých panelů.

Calculate: Většina funkcí je nedostupná. Zobrazí například rovinu nebo práškový diagram rozptylu rtg paprsků.

Search: Vyhledávání.

Databases: Výběr z uložené databáze.

Help: Spustí nápovědu, otevře internetovou stránku s informacemi o softwaru Mercury nebo nabídne registraci.

#### Lišta 1:





Style: Volba stylů zobrazení.

Colour: Výběr barvy například podle prvků.

Picking Mode: Výběr atomů, vazeb, měření vzdálenosti a velikosti úhlů.

#### Lišta 2:

 Znázorní model ve směru krystalografických/reciprokových os.

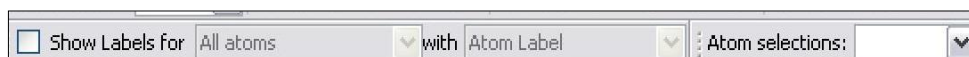
 Posune model o malý úhel v daném směru.

 Otočí model o 90° v daném směru.

 Posune celý model v daném směru.

 Zvětší/zmenší model

#### Lišta 3:



Umožňuje nastavení popisků.

#### Pravý panel:

Funguje jako strukturní navigátor.

### Možnosti zobrazení:

Tento panel nabízí například vyplnění celé elementární buňky (packing), zobrazí bližší informace o struktuře (seznam s délkami všech vazeb), práškový diagram, popisky nebo krystalové osy.

### Podporované vstupní formáty:

Program Mercury podporuje celkem 13 vstupních formátů. Jmenovitě to jsou například soubory Cambridgeské strukturní databáze (Cambridge Structural Database), CIF soubory, PDB soubory, SHELX soubory či MOL soubory.

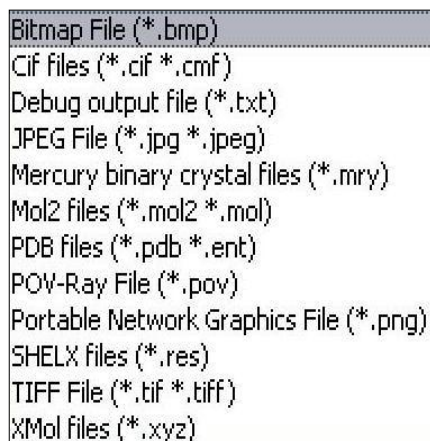
### Podporované výstupní formáty:

Program podporuje celkem 12 formátů. Například Bitmap soubor, JPEG soubor či TIFF soubor.



CSD-format Databases (\*.ind)  
Cif files (\*.cif \*.cmf)  
ConQuest hits (\*.c2m)  
Generated motifs (\*.gmxml)  
MOL files (\*.mol \*.sdf \*.sd \*.mdl)  
MOPAC results files (\*.aux)  
Mercury binary crystal files (\*.mry)  
Mol2 files (\*.mol2 \*.mol)  
Motif searches (\*.msxml)  
Motifs (\*.mxml)  
PDB files (\*.pdb \*.ent)  
SHELX files (\*.res)  
XMol files (\*.xyz)

**Obr. 9: Mercury – vstupní formáty s příponami**



Bitmap File (\*.bmp)  
Cif files (\*.cif \*.cmf)  
Debug output file (\*.txt)  
JPEG File (\*.jpg \*.jpeg)  
Mercury binary crystal files (\*.mry)  
Mol2 files (\*.mol2 \*.mol)  
PDB files (\*.pdb \*.ent)  
POV-Ray File (\*.pov)  
Portable Network Graphics File (\*.png)  
SHELX files (\*.res)  
TIFF File (\*.tif \*.tiff)  
XMol files (\*.xyz)

**Obr. 10: Mercury – výstupní formáty s příponami**

### Shrnutí – výhody programu:

- Možnost otáčení modelem přesně o 90° v daném směru.
- Jednoduché měření vzdáleností a úhlů.
- Možnost přímého kopírování snímku.
- Jednoduché měření vzdáleností a úhlů.
- Zobrazí seznam pozic atomů a délek vazeb.



#### Shrnutí – nevýhody programu:

- Nelze tvořit vlastní struktury.
- Je nutné mít vlastní databázi struktur.
- Nelze mazat atomy.

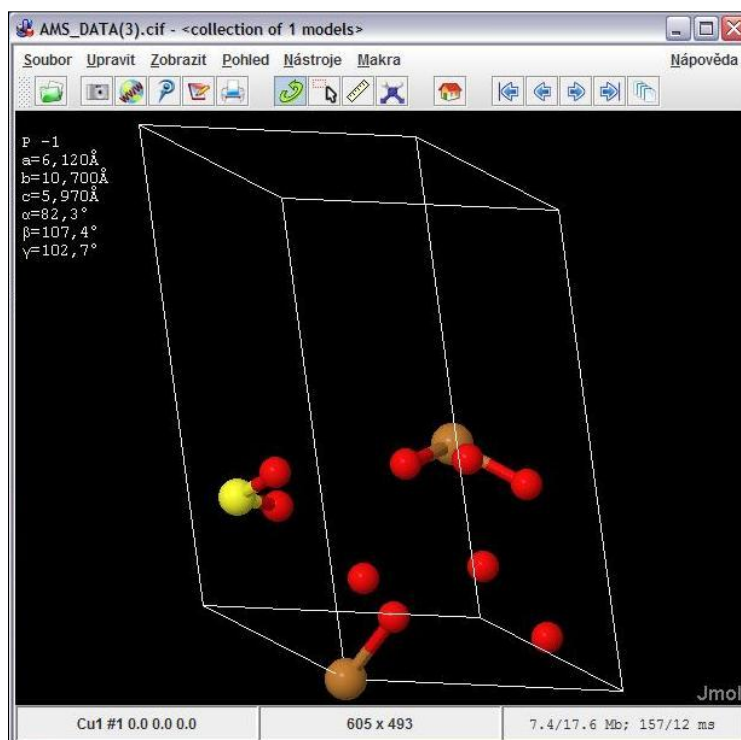
### 2.1.4 Jmol 12.0.39

#### Získání softwaru:

Popis a základní informace o softwaru Jmol najdeme na internetové adrese [jmol.sourceforge.net/](http://jmol.sourceforge.net/).

Samotný software stáhneme na adrese [jmol.sourceforge.net/download/](http://jmol.sourceforge.net/download/), kde v sekci *Downloading Jmol* vybereme *Jmol downloads page*. V horní části následující stránky klikneme na odkaz *Download Jmol-12.0.39-binary.zip (16.0 MB)*, a tím spustíme stahování.

Při spuštění programu se otevrou 2 okna – okno programu a systémové okno. To se nesmí zavřít, jinak dojde k ukončení celého programu.

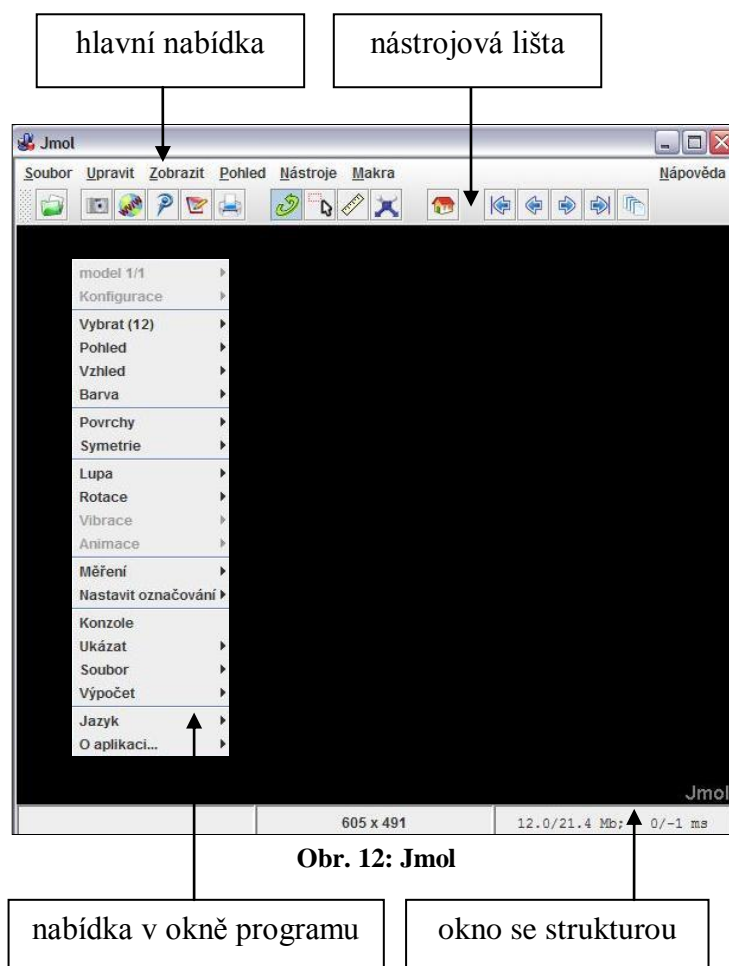


Obr. 11: Ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$

### Systémové požadavky:

Program vyžaduje operační systém Microsoft Windows NT/2000/XP/Vista a 16,5 MB volného místa na disku.

### Základní orientace v programu:



Obr. 12: Jmol

### *Hlavní nabídka:*

<b>S</b> oubor	<b>U</b> pravit	<b>Z</b> obrazit	<b>P</b> ohled	<b>N</b> ástroje	<b>M</b> akra	<b>N</b> ápověda
----------------	-----------------	------------------	----------------	------------------	---------------	------------------

Soubor: Otevření formátu se strukturou, URL a posledních souborů. Možnost exportu a tisku struktury. Otevření skriptovací konzole, editoru skriptů či zavření programu.

Upravit: Vložení a kopírování struktury.

**Zobrazit:** Výběr jednotlivých atomů, velikostí atomů a vazeb, vlastností popisků a vektorů, zvětšení struktury, zobrazení hloubky perspektivy, os, hraničního boxu. Určení výšky a šířky struktury.

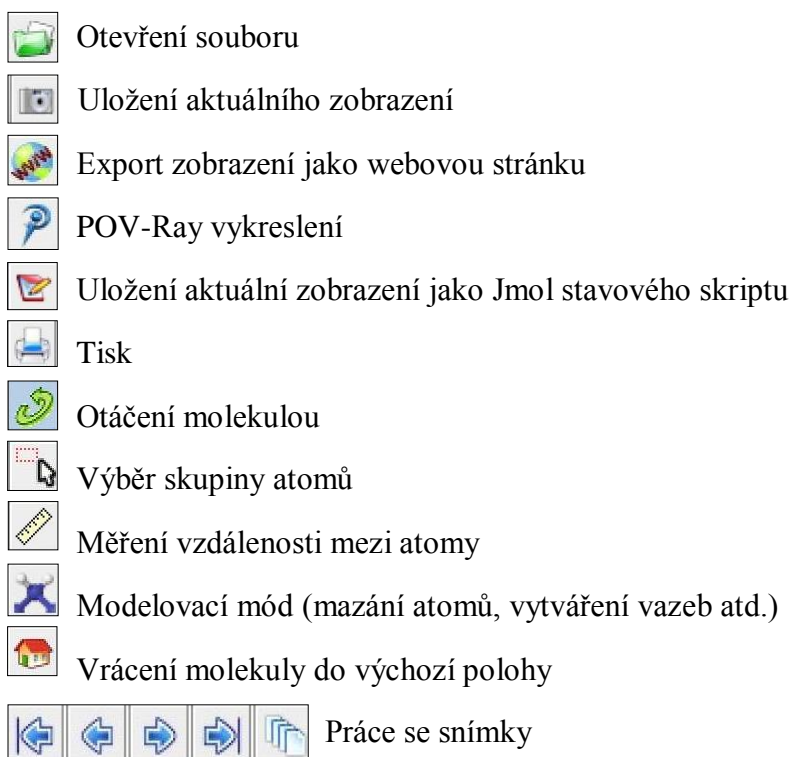
**Pohled:** Výběr pohledu zepředu, zleva, zprava, shora, zdola a určení středu.

**Nástroje:** Měření vzdálenosti atomů, výběr jednotek vzdálenosti, možnost vytváření animací, vibrace a výběr skupiny atomů.

**Makra:** Vytváření a spouštění makra.

**Nápověda:** Zobrazí například uživatelskou příručku v anglickém jazyce.

#### *Nástrojová lišta:*



#### *Nabídka v okně programu:*

**Vybrat:** Výběr prvků, zobrazení pouze vybraných atomů.

**Pohled:** Výběr pohledu z různých stran.

**Vzhled:** Obsahuje mnoho funkcí, například výběr modelu (kalotový, drátový atd.), velikost atomů/vazeb nebo zobrazení vodíkových/disulfidových můstků.

Barva: Barva atomů, vazeb, pozadí, vektorů, vodíkových můstků atd.

Povrchy: Výběr povrchů (tečkovaný, molekulární atd.)

Symetrie: Zobrazí vyplněnou elementární buňku krystalu.

Lupa: Přiblíží/oddálí strukturu.

Rotace: Spustí rotaci podle jednotlivých os. Možnost navolení rychlosti.

Měření: Změří vzdálenost atomů, velikost úhlů či torze.

Nastavit označování: Výběr atomu, molekuly, prvku nebo vazného místa.

Konzole: Spustí skriptovací konzoli.

Ukázat: Ve skriptovací konzoli ukáže například orientaci, symetrii, obsah souboru.

Soubor: Otevření souboru, uložení skriptu nebo export obrázku.

Výpočet: Optimalizace struktury, spuštění modelování.

Jazyk: Výběr jazyka.

O aplikaci: Obsahuje například informace o verzi programu, využití Java paměti.

#### Podporované vstupní formáty:

Program podporuje více než 40 různých formátů. Jmenovitě to jsou například: CIF, mmCIF (Macromolecular Crystallographic Information File), XYZ formát, PDB formát, JME (Java Molecular Editor) a mnoho dalších.

#### Podporované výstupní formáty:

Existuje několik možností, jak pracovat s výslednou strukturou:

- Exportuje se jako obrázek ve formátu JPEG, PNG, GIF, PPM nebo PDF.
- Exportuje se jako webová stránka.
- Exportuje se jako POV formát do programu POV-Ray (Persistence of Vision Raytracer), který slouží k vykreslování trojrozměrných scén ve vysoké kvalitě.
- Uloží se jako SPT formát (SpeedTree Data File), což je obrázkový 3D formát.
- Exportuje se jako vstupní soubor Gaussianu, což je program, který lze použít pro širokou škálu studia molekul a chemických reakcí za různých podmínek.

#### Shrnutí – výhody programu [6]:

- Možnost vytváření animací. V hlavní nabídce zobrazíme skriptovací konzoli kliknutím na Soubor → Konzole. Základní informace o tvorbě animací a přehled příkazů včetně možnosti ukázky najdeme například na internetové adrese [www.callutheran.edu/Academic\\_Programs/Departments/BioDev/omm/scripting/molmast.htm](http://www.callutheran.edu/Academic_Programs/Departments/BioDev/omm/scripting/molmast.htm).
- Možnost vytvoření makra, což je sled příkazů, který se dá uložit a následně spustit kliknutím na *Makra* v hlavní nabídce programu.
- Součástí softwaru je tzv. applet, což je softwarová komponenta, která funguje v rámci internetového prohlížeče. Dá se tedy spustit na internetu a využít jako součást webových stránek.
- Program je v českém jazyce.
- Program je zdarma dostupný na internetu.

#### Shrnutí – nevýhody programu:

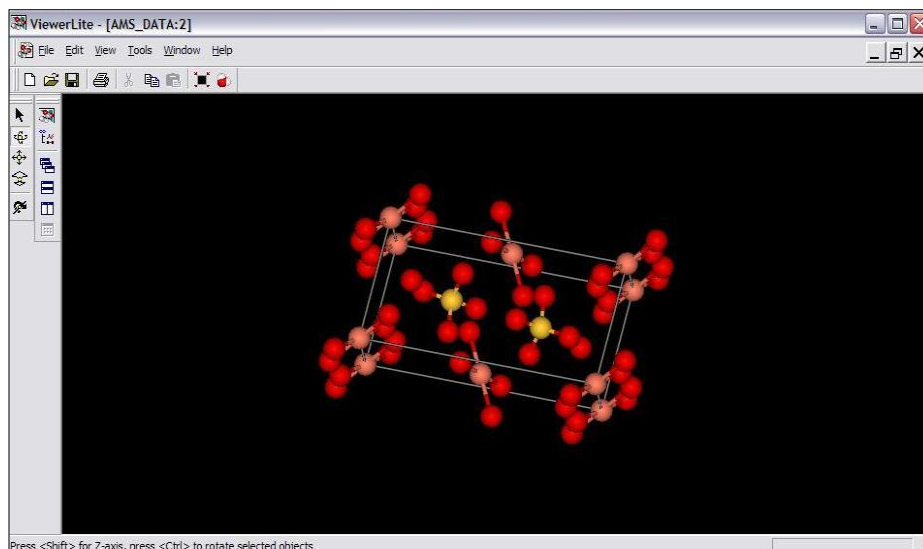
- Nelze tvořit vlastní struktury, program modely pouze zobrazuje.
- Všechny modely se musí uložit přímo do adresáře programu na místním disku.

### **2.1.5 ViewerLite 5.0**

#### Získání softwaru:

Tento software společnosti Accelrys stáhneme na webové adrese [www.infochembio.ethz.ch/en/SFS\\_tips02.html](http://www.infochembio.ethz.ch/en/SFS_tips02.html).

Po stisknutí *Download* v horní části stránky se spustí samotné stahování programu.

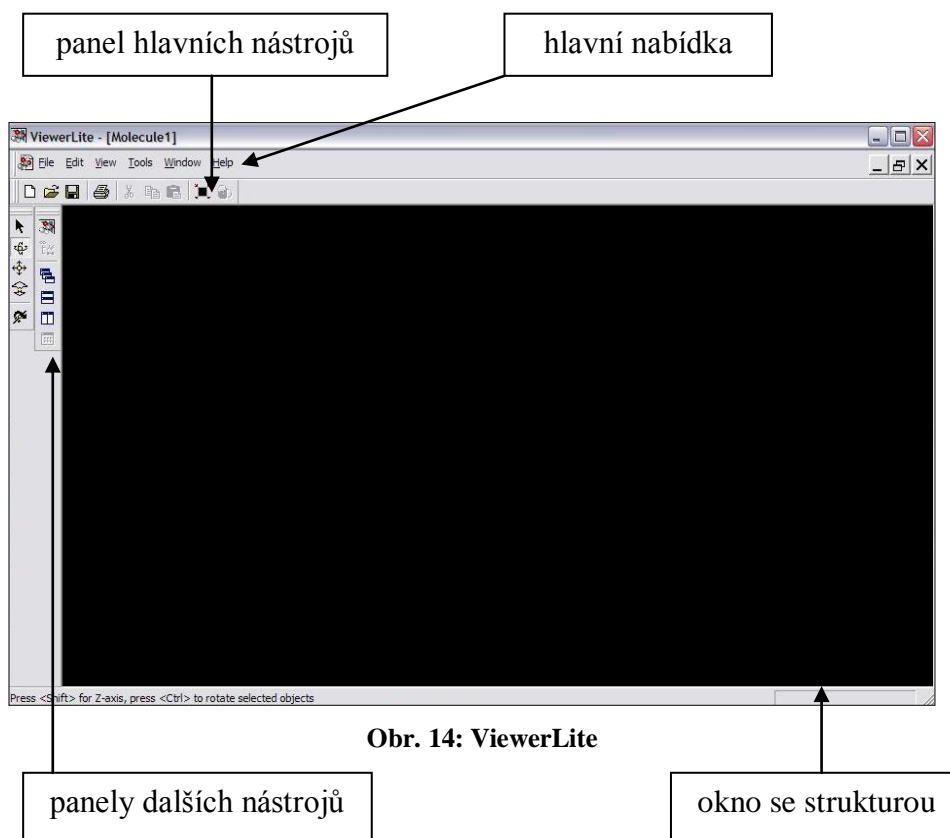


Obr. 13: Ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$

#### Systémové požadavky:

Tento program vyžaduje operační systém Microsoft Windows a 11 MB volného místa na disku.

#### Základní orientace v programu:



Obr. 14: ViewerLite

### *Hlavní nabídka:*

#### Tlačítka:

**File:** Umožňuje otevřít vstupní soubor, otevřít oblast (webovou stránku), zavřít okno se strukturou, uložit či tisknout strukturu, náhled tisku, nastavení tisku, odeslání (e-mailem) a zavření programu.

**Edit:** Umožňuje úpravy jako jít o krok zpět/vpřed, vyjmout, kopírovat, vložit, vymazat, vložit ze (souboru), vložit z oblasti (webové stránky), vybrat vše, vybrat, vybrat skupinu nebo zobrazit vlastnosti atomu.

**View:** Výběr stylu zobrazení molekuly (tyčinky a kuličky, kaloty atd.), barvy vybrané části molekuly, vrátí zpět rotaci, přizpůsobí náhled modelu obrazovce, vycentruje strukturu, zobrazí ji na celou obrazovku, rozdělí obrazovku dvojmo. Dále například ukáže/skryje vybrané ovládací panely a v poslední možnosti – nastavení, umožní vybrat kvalitu modelu, nasvícení nebo styly zobrazení.

**Tools:** Zde nastavíme zobrazení popisků, povrch molekuly (přidá ji texturu jako povrch), zobrazení krystalové buňky (můžeme upravit tloušťku a barvu os).

**Window:** Stejný obsah jako *panel dalších nástrojů* popsáný níže.

**Help:** Spustí témata nápovědy nebo například odkáže na webové stránky společnosti Accelrys.

### *Panel hlavních nástrojů:*



Nový



Otevřít



Uložit



Tisk



Vyjmout



Kopírovat



Vložit



Roztáhnout po obrazovce



Styl zobrazení

*Panely dalších nástrojů:*



Podporované vstupní formáty:

Program podporuje celkem 18 vstupních formátů. Přehled je uveden níže.

Viewer (*.msv)	Sybyl MOL2 Files (*.mol2)
Brookhaven PDB Files (*.pdb,*.ent)	Cerius2 Files (*.msi)
MDL MOL Files (*.mol,*.sdf,*.sd,*.mdl)	Catalyst Files (*.cpd)
InsightII CAR Files (*.car)	Catalyst Query Files (*.chm)
Cambridge Crystallographic (*.csd,*.fdat,*.dat)	Crystallographic Information Files (*.cif)
Quanta Files (*.msf)	XYZ Coordinate (*.xyz)
Sybyl MOL2 Files (*.mol2)	MDL Sketch (*.skc)
Cerius2 Files (*.msi)	InsightII Grid Files (*.grd)
Catalyst Files (*.cpd)	Viewer Script Files (*.wvc,*.log)

**Obr. 15: ViewerLite – vstupní formáty s příponami**

Podporované výstupní formáty:

Program podporuje celkem 13 výstupních formátů. Patří sem obrázky v GIF, JPEG, Bitmap a PNG formátu plus další uvedené níže.

Viewer (*.msv)
Brookhaven PDB Files (*.pdb,*.ent)
MDL MOL Files (*.mol,*.sdf,*.sd,*.mdl)
XYZ Coordinate (*.xyz)
Catalyst Files (*.cpd)
Catalyst Query Files (*.chm)
VRML World Files (*.wrl)
POV-Ray Scene Files (*.pov)
Smiles Files (*.smi)

**Obr. 16: ViewerLite – výstupní formáty s příponami**

Shrnutí – výhody programu:

- Kvalitní 3D zobrazení.
- Intuitivní a přehledné ovládání programu.



- Hardwarová nenáročnost.

#### Shrnutí – nevýhody programu:

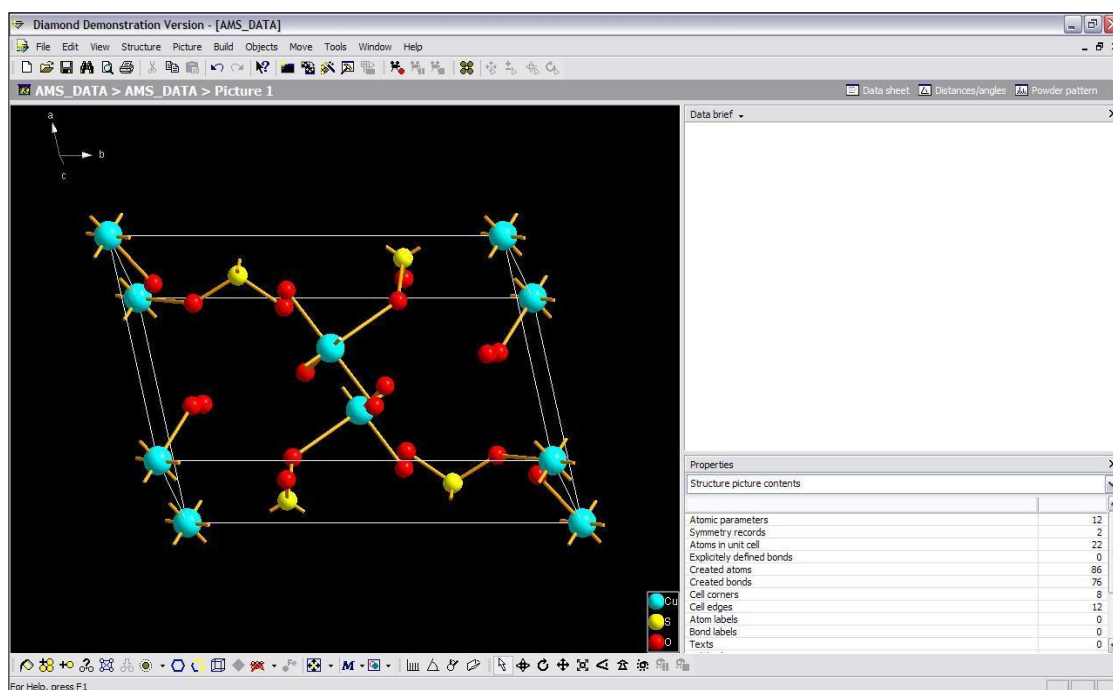
- Nelze tvořit vlastní struktury, program modely pouze zobrazuje.
- Software je sice volně dostupný na internetu, avšak jeho vyhledání je obtížné
- Program má poměrně málo funkcí a poskytuje minimum údajů vhodných pro zkoumání vnitřní stavby minerálů.

### 2.1.6 Diamond 3.2g

#### Získání softwaru:

Demo verzi tohoto programu lze stáhnout na webové adrese [www.crystalimpact.com/diamond/](http://www.crystalimpact.com/diamond/), kde najdeme i informace o společnosti Crystal Impact a jejích dalších produktech.

Vlevo na stránce klikneme na *Demo Version* a na stránce následující na *Download Diamond Demo Version 3.2g (Diamond-Demo-Setup-32g.exe)*. Srolujeme-li stránku níže, najdeme zde i odkaz na manuál programu v anglickém jazyce *Download Tutorial in English (tutorial.pdf)*.

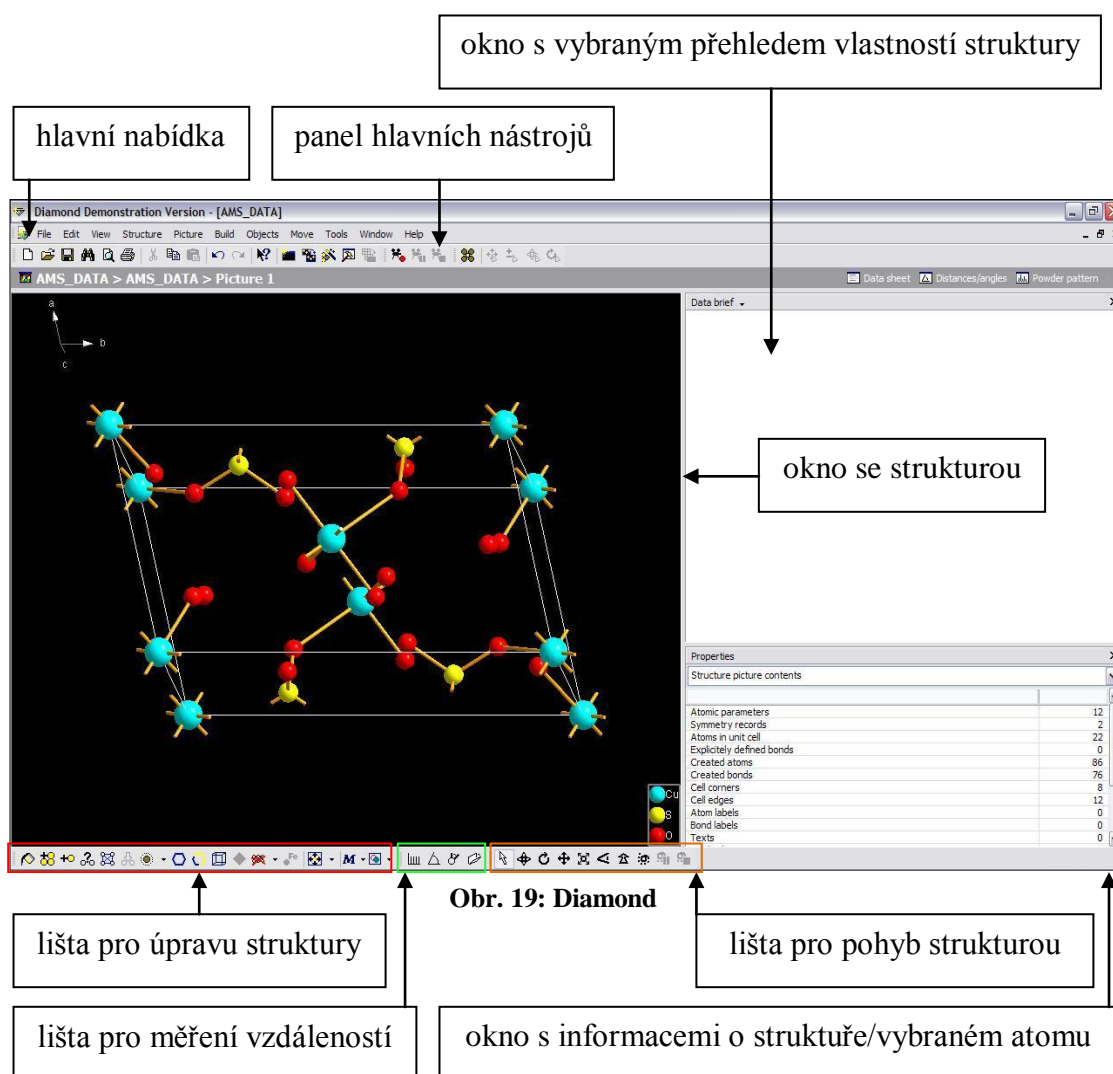


Obr. 17: Diamond – ukázka struktury  $\text{CuSO}_4 \cdot 5 \text{H}_2\text{O}$

### Systémové požadavky:

Tento program vyžaduje operační systém Microsoft Windows 98, ME, 2000, XP, 2003 Server, Vista, nebo Windows 7. Dále 64 MB RAM paměti a 100 MB volného místa na disku.

### Základní orientace v programu:



### *Hlavní nabídka:*

Její obsah je koncipován velmi podobně jako u předchozích programů, jsou zde zahrnuty i jednotlivé lišty. Hlavní nabídka umožňuje například vytvořit vlastní

strukturu, zobrazit práškový diagram, změnit vzhled atomů a vazeb či spustit průvodce programem.

*Panel hlavních nástrojů:*



Popisováno zleva doprava:

- |                                |  |
|--------------------------------|--|
| • Nový soubor                  | • Vytvořit obrázek automaticky         |
| • Otevřít                      | • Definovat vlastní schéma             |
| • Uložit                       | • Oddělit strukturu                    |
| • Najít                        | • Nahrát videozáznam                   |
| • Vytisknout náhled            | • Pauza ve videozáznamu                |
| • Vytisknout                   | • Ukončit videozáznam                  |
| • Vyjmout                      | • Vložit atom                          |
| • Kopírovat                    | • Posunout vybrané atomy po ose X/Y    |
| • Vložit                       | • Posunout vybrané atomy po ose Z      |
| • O krok zpět                  | • Rotovat vybranými atomy podél os X/Y |
| • O krok vpřed                 | • Rotovat vybranými atomy podél osy Z  |
| • Nápověda                     |  |
| • Nový prázdný obrázek         |  |
| • Zkopírovat do nového obrázku |  |

*Okno s vybraným přehledem vlastností struktury:*

Dle výběru zobrazí například seznam atomů s jejich souřadnicemi, seznam všech rovin nebo seznam úhlů.

*Okno s informacemi o struktuře/vybraném atomu:*

Lze volit různé možnosti. Zobrazí například souhrnné informace o struktuře jako celkový počet atomů, vazeb, úhlů nebo popisků atomů.

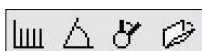
*Lišta pro úpravu struktury:*



Popisováno zleva doprava:

- Vyplnit elementární buňku
- Přidat všechny atomy
- Přidat atom
- Spojení
- Spojit atomy
- Vložit vazbu
- Vyplnit koordinační oblasti
- Získat molekuly
- Vyplnit úsek
- Přidat hrany elementární buňky
- Přidat mnohostěny
- Zrušit vše
- Přidat popisky
- Vycentrovat/přizpůsobit velikosti okna
- Vybrat styl zobrazení modelu
- Nastavit (osvětlení, zobrazení os atd.)

*Lišta pro měření vzdáleností:*



Popisováno zleva doprava:

- Vzdálenost libovolných dvou atomů
- Velikost úhlu
- Velikost torzního úhlu
- Velikost roviny

*Lišta pro pohyb strukturou:*



Popisováno zleva doprava:

- Zrušit označení
- Otočit podél os X, Z
- Otočit podél osy Z
- Posunout strukturu
- Přiblížit/oddálit
- Změnit perspektivu
- Možnost „vstoupení“ do struktury
- Rotovat
- Přerušit rotaci
- Zastavit rotaci

### Podporované vstupní formáty:

Program podporuje celkem 14 vstupních formátů. Přehled je uveden níže.

```
Diamond 3 Document (*.diamdoc)
Diamond 1.x/2.x, Endeavour 1.x (*.dsf;*.edf;*.ds1)
Endeavour Configuration File (*.cfg)
CIF (*.cif)
ICSD/Crystin (*.cry)
CSD-FDat (*.csd;*.dat)
Protein Data Bank (*.pdb;*.ent)
Shelx (*.ins;*.res;*.dat)
XPert Plus (*.idf)
KPlot (*.kpl;*.dat)
XYZ (*.xyz)
Endeavour Molecule (*.emo)
MDL Molfile (*.mol;*.mdl)
Cerius2 CSSR (*.cssr)
```

**Obr. 19: Diamond – vstupní formáty s příponami**

### Podporované výstupní formáty:

Ukládat můžeme jako dokument, strukturu nebo obrázek.

Funkce uložit dokument v různých formátech je dostupná pouze v plné verzi softwaru.

Strukturu můžeme uložit prostřednictvím změny formátu souborů a poté ji exportovat do jiných vizualizačních programů.

```
Endeavour Configuration (*.cfg)
CIF (*.cif)
CRYSTIN (*.cry)
Cambridge CSD (*.csd;*.dat;*.fdat)
Protein Data Bank (*.pdb;*.ent)
ShelX (*.ins;*.res;*.dat)
Schakal (*.dat)
XYZ (*.xyz)
KPlot (*.kpl)
Endeavour Molecule (*.emo)
MDL Molfile (*.mol;*.mdl)
Cerius2 CSSR (*.cssr)
```

**Obr. 20: Diamond – výstupní formáty s příponami**

Obrázek zobrazované struktury můžeme uložit v různých grafických formátech jako JPEG, Bitmap, GIF, Portable Network Graphics, TIFF, Windows Metafile a VRML.

Shrnutí – výhody programu:

- Intuitivní ovládání.
- Pracovní prostředí je přehledné.
- Možnost vytváření vlastních struktur.
- Součástí je podrobný průvodce programem v anglickém jazyce.

Shrnutí – nevýhody programu:

- V demoverzi se přes uložené obrázky zobrazují popisky.

## 3 PRAKTICKÁ ČÁST

### 3.1 Polymorfie

Polymorfie je jev, kdy jedna chemická sloučenina krystalizuje ve více strukturách. Během krystalizace dochází vždy k takovému vnitřnímu uspořádání, které za daných teplotně-tlakových podmínek odpovídá minimální vnitřní energii krystalu. Za různých podmínek tedy dochází k různému uspořádání týchž stavebních částic, vznikají tedy různé polymorfní modifikace jedné látky [7]. Polymorfie chemického prvku se nazývá alotropie.

Z termodynamického hlediska se rozlišují dva typy polymorfie:

- Enantiotropie
- Monotropie

**Enantiotropie** je přeměna, která probíhá oboustranně (reverzibilně). Při tomto typu reakce dochází pouze k posunům stavebních jednotek v rámci struktury. Mohou se tedy například měnit vazebné úhly nebo vzdálenosti atomů. Nedochází zde k destrukci vazeb. Příkladem enantiotropie je přeměna křemene na tridymit a poté na cristobalit.

**Monotropie** je přeměna, která probíhá pouze jedním směrem (ireverzibilně). Při tomto ději dochází k rozsáhlému přeuspořádání struktury na jiný typ, přičemž dochází k destrukci vazeb a vzniku vazeb jiných. Tato přeměna vyžaduje značné množství energie. Vzhledem k tomu, že přeměna proběhne pouze při vysoké aktivační energii, vysokoteplotní modifikace zůstávají často v tzv. metastabilním stavu i mnoho milionů let [8]. **Metastabilita** je příčinou, proč se na zemském povrchu vyskytují minerály, které za povrchových podmínek nemohou vzniknout. Příkladem monotropie je přeměna diamantu na grafit.

#### 3.1.1 Modifikace uhlíku (C)

##### Grafit

Krystalová soustava: šesterečná

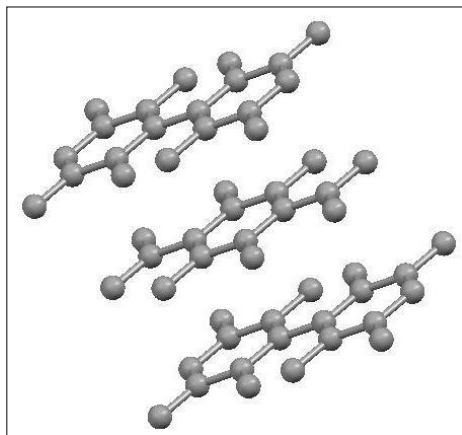
Velikost elementární buňky:  $a = 2,456 \text{ Å}$ ,  $b = 4,254 \text{ Å}$ ,  $c = 6,696 \text{ Å}$

Objem buňky:  $35,18 \text{ \AA}^3$  [9]

Hustota:  $2,26 \text{ g/cm}^3$  [9]

Vzdálenost sousedních atomů uhlíku:  $1,418 \text{ \AA}$

Vzdálenost mezi vrstvami atomů uhlíku:  $3,348 \text{ \AA}$



Obr. 20: Struktura grafitu – použita CIF data [10]

## Diamant

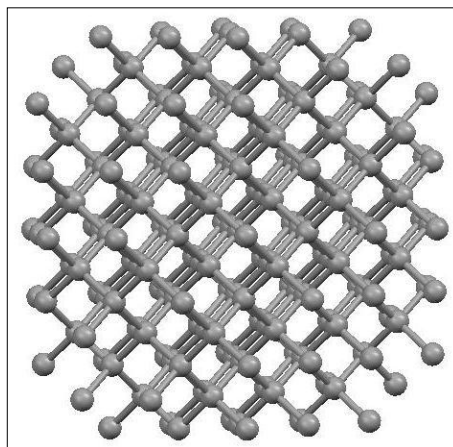
Krystalová soustava: krychlová

Velikost elementární buňky:  $a = 3,567 \text{ \AA}$ ,  $b = 3,567 \text{ \AA}$ ,  $c = 3,567 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $45,10 \text{ \AA}^3$  [11]

Hustota:  $3,515 \text{ g/cm}^3$  [11]

Vzdálenost sousedních atomů uhlíku:  $1,544 \text{ \AA}$



Obr. 21: Struktura diamantu – použita CIF data [12]



## Lonsdaleit

Krystalová soustava: šesterečná

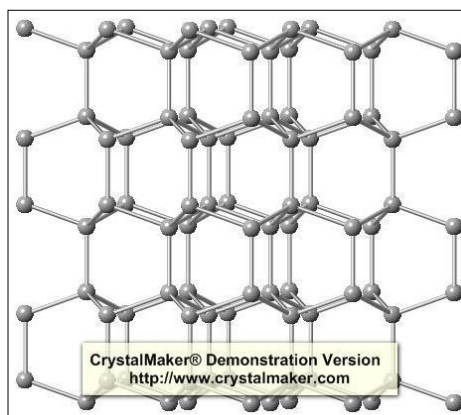
Velikost elementární buňky:  $a = 2,52 \text{ \AA}$ ,  $b = 2,52 \text{ \AA}$ ,  $c = 4,12 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $22,48 \text{ \AA}^3$  [13]

Hustota:  $3,51 \text{ g/cm}^3$  [13]

Vzdálenost sousedních atomů uhlíku – na obrázku spojeny vazbami vždy horizontálně:  
 $1,543 \text{ \AA}$

Vzdálenost sousedních atomů uhlíku – na obrázku spojeny vazbami vždy vertikálně:  
 $1,545 \text{ \AA}$



Obr. 22: Struktura lonsdaleitu – použita CIF data [14]

## Shrnutí

Výše zmíněné modifikace uhlíku disponují rozdílnými vlastnostmi, a to právě díky odlišné vnitřní struktuře.

Grafit je složen z vrstev, které jsou vzájemně přitahovány pouze slabými Van der Waalsovými silami. Proto se podél těchto vrstev snadno štípe a zanechává na papíře stopu.

Diamant má dokonale pravidelnou strukturu, ve které jsou atomy uhlíku spojeny kovalentními vazbami a nachází se od sebe vždy ve stejné vzdálenosti.

Lonsdaleit se již na první pohled velmi podobá diamantu, avšak jeho struktura není natolik dokonalá. Atomy uhlíku jsou taktéž vázány kovalentními vazbami se čtyřmi sousedy, avšak vzdálenost mezi atomy se podél osy  $c$  liší.

Podle vnitřní struktury můžeme porovnat i tvrdost daných modifikací. Vzhledem k tomu, že je tvrdost závislá na pevnosti vazeb mezi částicemi, vzdálenostmi částic či na pravidelnosti krystalové mřížky, můžeme vyvodit tyto závěry: grafit bude díky vrstvám uhlíků spojených pouze slabými vazbami nejměkčí. Diamant bude díky dokonale pravidelnému uspořádání uhlíků spojených kovalentními vazbami naopak nejtvrdší. Lonsdaleit je sice velmi podobný diamantu, avšak podle osy c se vzdálenost uhlíků mění a činí ho tedy méně pravidelným a pevným než je diamant, ale stále mnohem pevnějším než je grafit.

### 3.1.2 Modifikace uhličitanu vápenatého ( $\text{CaCO}_3$ )

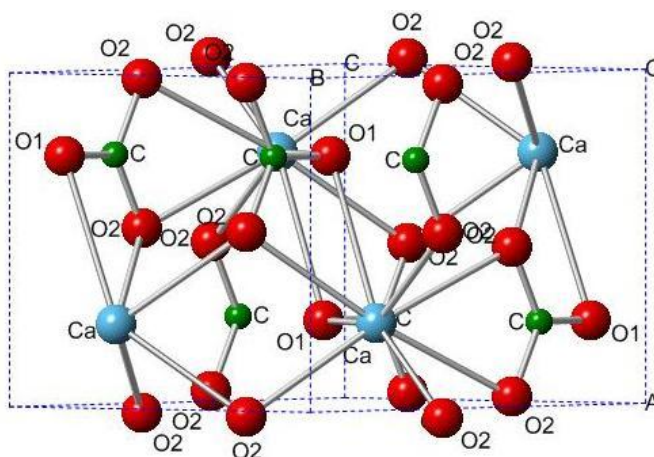
#### Aragonit

Krystalová soustava: kosočtverečná

Velikost elementární buňky:  $a = 4,961 \text{ \AA}$ ,  $b = 7,967 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,74 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $226,17 \text{ \AA}^3$  [15]

Hustota:  $2,944 \text{ g/cm}^3$  [15]



Obr. 23: Struktura aragonitu – použita CIF data [16]

Struktura: Na každý vápenatý kation se váže devět kyslíků, a to ve vzdálenostech dvakrát  $2,445 \text{ \AA}$ , dvakrát  $2,55 \text{ \AA}$ , dvakrát  $2,653 \text{ \AA}$ , dvakrát  $2,52 \text{ \AA}$  a jednou  $2,419 \text{ \AA}$ . Na atomy uhlíku se vážou tři atomy kyslíku a to pod úhly  $120,22^\circ$ ,  $119,5^\circ$  a  $120,22^\circ$ . Tyto kyslíky se poté spojují se třemi vápenatými kationty a jedním uhlíkem. Vzdálenost

mezi dvěma nejbližšími kationty vápníku je 3,95 Å a mezi nejbližšími atomy uhlíku 2,877 Å.

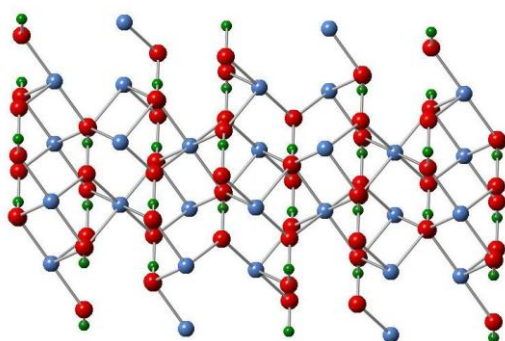
## Kalcit

Krystalová soustava: klencová

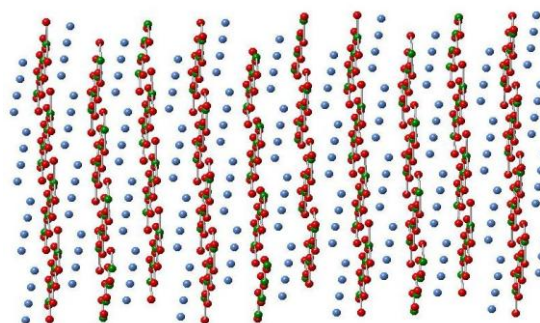
Velikost elementární buňky:  $a = 4,99 \text{ Å}$ ,  $b = 4,99 \text{ Å}$ ,  $c = 17,062 \text{ Å}$

Objem buňky:  $367,85 \text{ Å}^3$  [17]

Hustota:  $2,711 \text{ g/cm}^3$  [17]



Obr. 24: Struktura kalcitu – použita CIF data [18]



Obr. 25: Kalcit – skluzové roviny

Struktura: Na každý vápenatý kation se váže šest atomů kyslíku, a to pod úhlem  $87,38^\circ$  nebo  $92,62^\circ$ . Atomy kyslíku jsou od vápenatých kationtů vzdáleny  $2,357 \text{ Å}$ . Na každý atom uhlíku se vážou tři atomy kyslíku, a to pod úhlem  $120^\circ$ . Tyto kyslíky se poté spojují se dvěma vápenatými kationty, mezi nimiž je úhel  $118,32^\circ$ , a jedním atomem uhlíku. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty vápníku je  $4,048 \text{ Å}$ , mezi nejbližšími atomy uhlíku je vzdálenost stejná. Ve struktuře kalcitu jsou patrné jednotlivé vrstvy, které se vzájemně přitahují slabšími silami, a proto v těchto místech dochází ke štěpení minerálu.

## Shrnutí

Aragonit má sice stejné chemické složení jako rozšířenější kalcit, ale liší se od něj uspořádáním krystalové struktury. Ta je sice také složena ze skupin  $\text{CO}_3^{2-}$ , ty jsou ovšem uspořádány do dvou typů vrstev (liší se opačnou orientací aniontových skupin).

Zatímco aragonit krystalizuje v kosočtverečné krystalové soustavě, kalcit krystalizuje v klencové soustavě.

Aragonit je méně stabilní nízkoteplotní modifikací uhličitanu vápenatého a zhruba při teplotě 400 °C přechází na kalcit [19]. Této přeměny lze využít jako indikátoru geologických teplotních podmínek – pokud některá hornina obsahuje kalcit, pak je jasné, že vznikla za teploty vyšší než 400 °C.

### 3.1.3 Modifikace oxidu křemičitého (SiO<sub>2</sub>)

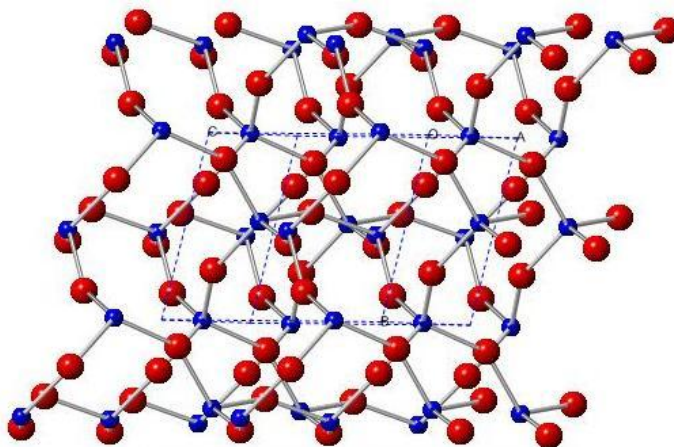
#### Křemen

Krystalová soustava: klencová

Velikost elementární buňky:  $a = 4,916 \text{ \AA}$ ,  $b = 4,916 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,405 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $113 \text{ \AA}^3$  [20]

Hustota:  $2,66 \text{ g/cm}^3$  [20]



Obr. 26: Struktura křemene – použita CIF data [21]

Struktura: Křemen je tvořen tetraedry SiO<sub>4</sub>. Atomy kyslíku jsou na atom křemíku navázány ve vzdálenostech dvakrát 1,605 Å a dvakrát 1,614 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy křemíku je 3,059 Å.

*Modifikace vznikající za vysoké teploty:*

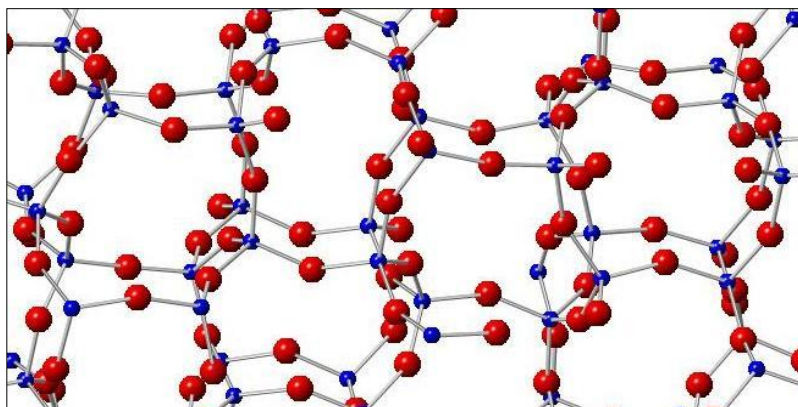
#### Tridymit

Krystalová soustava: trojklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 9,932 \text{ \AA}$ ,  $b = 17,216 \text{ \AA}$ ,  $c = 81,864 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $13996,16 \text{ \AA}^3$  [22]

Hustota:  $2,28 \text{ g/cm}^3$  [22]



Obr. 27: Struktura tridymitu – použita CIF data [23]

Struktura: Tridymit je tvořen tetraedry  $\text{SiO}_4$ . Atomy kyslíku jsou na atom křemíku navázány v různých vzdálenostech od  $1,591 \text{ \AA}$  do  $1,615 \text{ \AA}$ . Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy křemíku je  $3,038 \text{ \AA}$ .

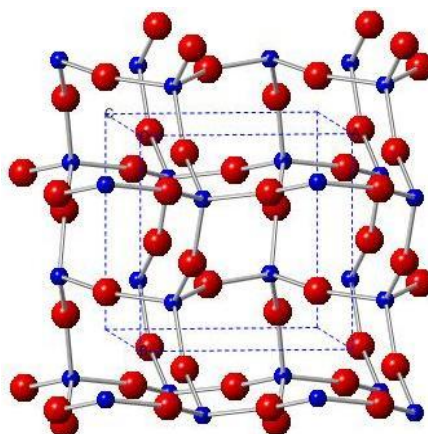
### Cristobalit

Krystalová soustava: čtverečná

Velikost elementární buňky:  $a = 4,971 \text{ \AA}$ ,  $b = 4,971 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,922 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $171,18 \text{ \AA}^3$  [24]

Hustota:  $2,33 \text{ g/cm}^3$  [24]



Obr. 28: Struktura cristobalitu – použita CIF data [25]

Struktura: Cristobalit je tvořen tetraedry  $\text{SiO}_4$ . Atomy kyslíku jsou na atom křemíku navázány pravidelně ve vzdálenosti 1,603 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy křemíku je 3,07 Å.

### **Shrnutí**

Za přírodních podmínek je křemen stabilní, ale při vyšších teplotách dochází k jeho přeměně. Při vzrůstu teploty nad 870 ° C proběhne polymorfní přeměna a struktura křemene se změní ve strukturu tridymitu. Podobně při 1470 °C se tridymit změní v cristobalit. Při poklesu teploty pod 1470 ° C proběhnou tyto změny opačně a výsledkem bude opět tridymit a nakonec křemen [26].

Při změnách teploty můžeme pozorovat i změnu ve vnitřní struktuře. Zatímco křemen krystalizuje v soustavě klencové, tridymit v soustavě trojklonné, kdy dojde ke změně vnitřního uspořádání tak, že se délky vazeb mezi atomem křemíku a atomy kyslíku změní (některé zkrátí, jiné prodlouží). U cristobalitu, který krystalizuje ve čtverečné soustavě, dojde k pravidelnému vnitřnímu uspořádání, kdy jsou atomy kyslíku od atomu křemíku ve stejné vzdálenosti.

### **3.1.4 Modifikace oxidu titaničitého ( $\text{TiO}_2$ )**

#### **Rutil**

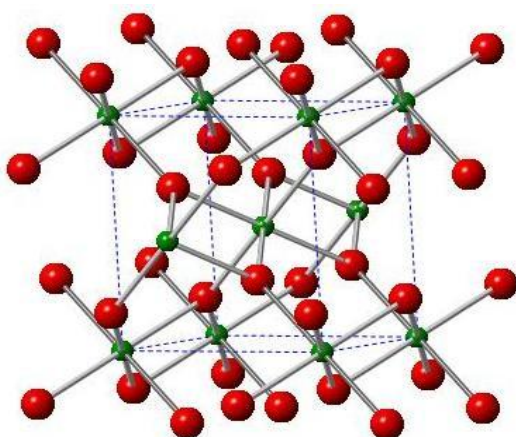
Krystalová soustava: čtverečná

Velikost elementární buňky:  $a = 4,593 \text{ Å}$ ,  $b = 4,593 \text{ Å}$ ,  $c = 2,959 \text{ Å}$

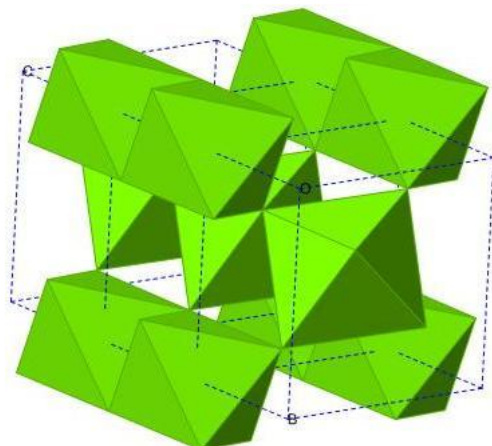
Objem buňky:  $62,43 \text{ Å}^3$  [27]

Hustota:  $4,25 \text{ g/cm}^3$  [27]





Obr. 30: Struktura rutilu – použita CIF data [28]



Obr. 29: Struktura rutilu – polyedry

Struktura: Rutil je tvořen oktaedry  $\text{TiO}_6$ . Vzdálenost mezi atomem titanu a atomy kyslíku tvořícími vrchol oktaedru je 1,982 Å. Zbylé čtyři atomy kyslíku jsou ve vzdálenosti 1,947 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy titanu je 3,569 Å.

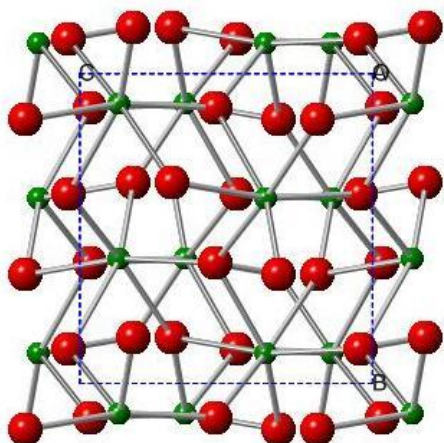
### Brookit

Krystalová soustava: kosočtverečná

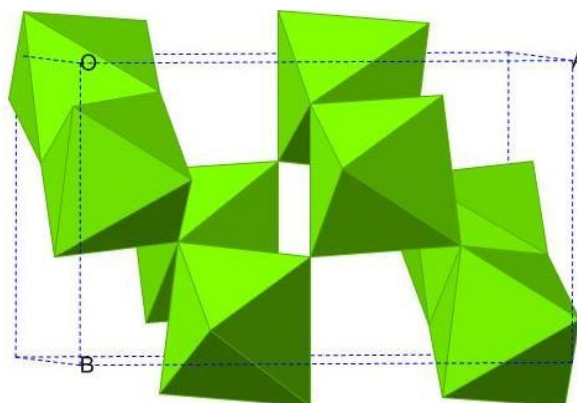
Velikost elementární buňky:  $a = 9,174 \text{ Å}$ ,  $b = 5,449 \text{ Å}$ ,  $c = 5,138 \text{ Å}$

Objem buňky:  $257,63 \text{ Å}^3$  [29]

Hustota:  $4,133 \text{ g/cm}^3$  [29]



Obr. 32: Struktura brookitu – použita CIF data [28]



Obr. 30: Struktura brookitu – polyedry

Struktura: Brookit je tvořen deformovanými oktaedry  $\text{TiO}_6$ . Vzdálenost mezi atomem titanu a atomy kyslíku je 1,999 Å, 1,863 Å, 1,990 Å, 1,923 Å, 2,052 Å a 1,931 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy titanu je 2,950 Å.

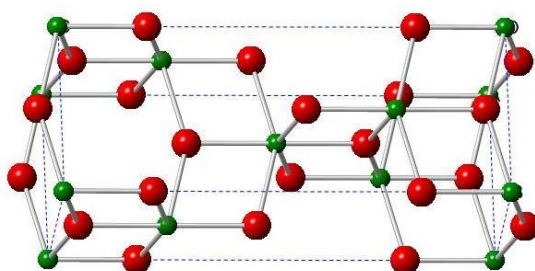
### Anatas

Krystalová soustava: čtverečná

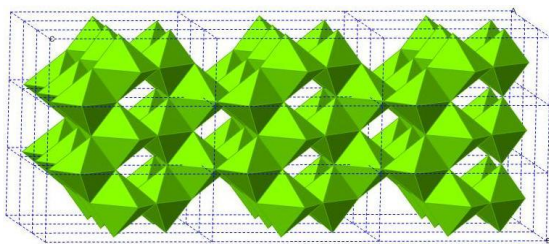
Velikost elementární buňky:  $a = 3,73 \text{ Å}$ ,  $b = 3,73 \text{ Å}$ ,  $c = 9,37 \text{ Å}$

Objem buňky:  $136,27 \text{ Å}^3$  [30]

Hustota:  $3,89 \text{ g/cm}^3$  [30]



Obr. 31: Struktura anatasu – použita CIF data [31]



Obr. 32: Struktura anatasu – polyedry

Struktura: Anatas je tvořen oktaedry  $\text{TiO}_6$ . Vzdálenost mezi atomem titanu a atomy kyslíku tvořícími vrchol oktaedru je 1,874 Å. Zbylé čtyři atomy kyslíku jsou ve vzdálenosti 1,923 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy titanu je 2,994 Å.

### Shrnutí:

Mezi polymorfní modifikace oxidu titaničitého patří minerály rutil a méně časté modifikace brookit a anatas. Všechny modifikace jsou tvořeny oktaedry  $\text{TiO}_6$ . Zatímco rutil a anatas krystalizují v soustavě čtverečné, brookit v soustavě kosočtverečné.

Zobrazení polyedrů umožňuje další náhled na strukturu. Kationy titaničité jsou obklopeny koordinačními polyedry a ty jsou vzájemně spojeny. V případě rutilu je



uspořádání velmi pravidelné, polyedry se dotýkají rohy a hranami. Brookit je tvořen deformovanými oktaedry  $\text{TiO}_6$ , což je u polyedrického zobrazení patrné. Polyedry se opět dotýkají rohy a hranami. Anatas má oproti tomu polyedry uspořádané tak, že je patrné spojení pomocí hran.

### 3.2 Izomorfie

Izomorfie je dle [32] schopnost atomů dvou či více prvků nebo jejich skupin vzájemně se zastupovat ve struktuře krystalu. Tento jev je v přírodě velmi rozšířený, izomorfní příměs je charakteristická pro drtivou většinu minerálů. Izomorfní mísení složek se projevuje změnou fyzikálních vlastností směsných krystalů (hustota, objem elementární buňky atd.).

Při podrobné klasifikaci minerálů je důležitým prvkem existence tzv. **izomorfních řad** nebo také **pevných roztoků** mezi minerály. Různé látky, které mají podobné složení a vytvářejí stejné krystalové tvary, mohou tvořit izomorfní řady, kde se tyto látky zastupují v různém poměru. Pevný roztok je krystalická látka s homogenní krystalovou strukturou, která je směsí dvou nebo více chemicky definovaných komponent [33]. Ukázka izomorfních řad je blíže popsána v následující podkapitole. Aby mohl být krystal považován za pevný roztok, musí být splněny dvě hlavní podmínky: izomorfní směs musí být homogenní, jak jsem již výše zmiňovala, a neuspořádaná [32].

- **Homogenní** – příměs je v krystalu uspořádaná co nejrovnoměrněji, nesmí se tvořit inkluze neboli shluky větších rozměrů.
- **Neuspořádaná** – částice příměsi jsou v krystalu rozptýleny statisticky. Pokud dojde k pravidelnému periodickému uspořádání, pak vzniká nový minerál s obvykle méně souměrnou strukturou, tzv. superstruktura.

K substituci ve struktuře minerálu může docházet za určitých podmínek. Tři nejdůležitější faktory umožňující substituci jsou dle [32]:

- **Geometrický faktor** – izomorfie vzájemně se zastupujících iontů je možná jen tehdy, mají-li podobnou velikost. Substitute je možná, neliší-li se poloměr iontů o více

než 15 %. Při větším rozdílu je izomorfie obtížná (probíhá za specifických podmínek, např. vysoké teploty) nebo nemožná. Z tohoto pravidla existují ovšem četné výjimky, hlavně u složitějších struktur.

- **Chemický faktor** – důležitým faktorem je valence (náboj) zastupujících se iontů. Je-li valence u iontů stejná, jedná se o tzv. izovalentní izomerii (např.  $\text{Mg}^{+2} \leftrightarrow \text{Fe}^{+2}$  v karbonátech). Je-li valence různá, jedná se pak o méně častější tzv. heterovalentní izomorfii. V tomto případě musí být elektrická neutralita struktury zajištěna dalším typem substituce. Např.  $(\text{Na}^+, \text{Si}^{+4}) \leftrightarrow (\text{Ca}^{+2}, \text{Al}^{+3})$  u živců.
- **Teplota** – obecně lze říci, že s vyšší teplotou dochází k dokonalejší mísivosti.

### 3.2.1 Izomorfní řada kalcitu

Do této skupiny patří minerály kalcit ( $\text{CaCO}_3$ ), magnesit ( $\text{MgCO}_3$ ), siderit ( $\text{FeCO}_3$ ), rodochrozit ( $\text{MnCO}_3$ ) a smithsonit ( $\text{ZnCO}_3$ ). Faktor umožňující substituci je v tomto případě geometrický faktor, což znamená, že symetrie minerálů je závislá na velikosti kationtu. Na následujících řádcích jsou popsány struktury tří zástupců, a to magnesitu, sideritu a rodochrozitu. Kalcit je již popsán na straně 52.

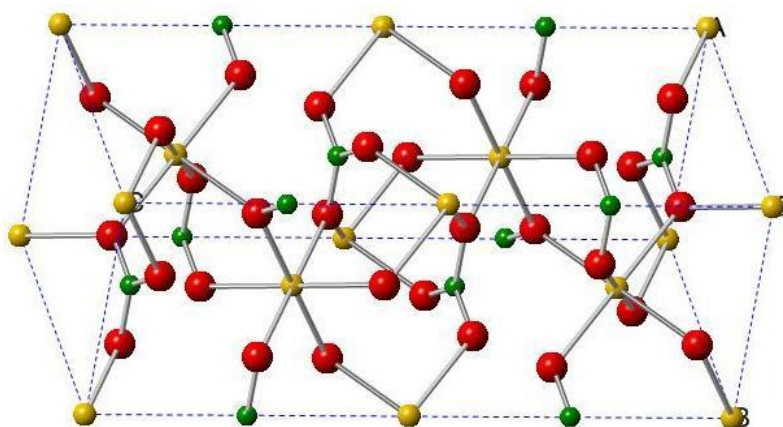
#### Magnesit

Krystalová soustava: klencová

Velikost elementární buňky:  $a = 4,633 \text{ \AA}$ ,  $b = 4,633 \text{ \AA}$ ,  $c = 15,016 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $282,76 \text{ \AA}^3$  [34]

Hustota:  $3,01 \text{ g/cm}^3$  [34]



Obr. 33: Struktura magnesitu – použita CIF data [18]

Struktura: Základem je uhličitanový anion, který je tvořen atomem uhlíku, na který jsou navázány tři atomy kyslíku pod úhlem  $120^\circ$  ve vzdálenosti  $1,286 \text{ \AA}$ . V šestičetné koordinaci s těmito kyslíky je pak hořečnatý kation, vzájemná vzdálenost je  $2,101 \text{ \AA}$  a úhel  $88,18^\circ$  nebo  $91,83^\circ$ . Každý atom kyslíku je koordinován se dvěma hořečnatými kationty a jedním atomem uhlíku. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty hořčíku je  $3,663 \text{ \AA}$  a mezi nejbližšími atomy uhlíku je vzdálenost stejná.

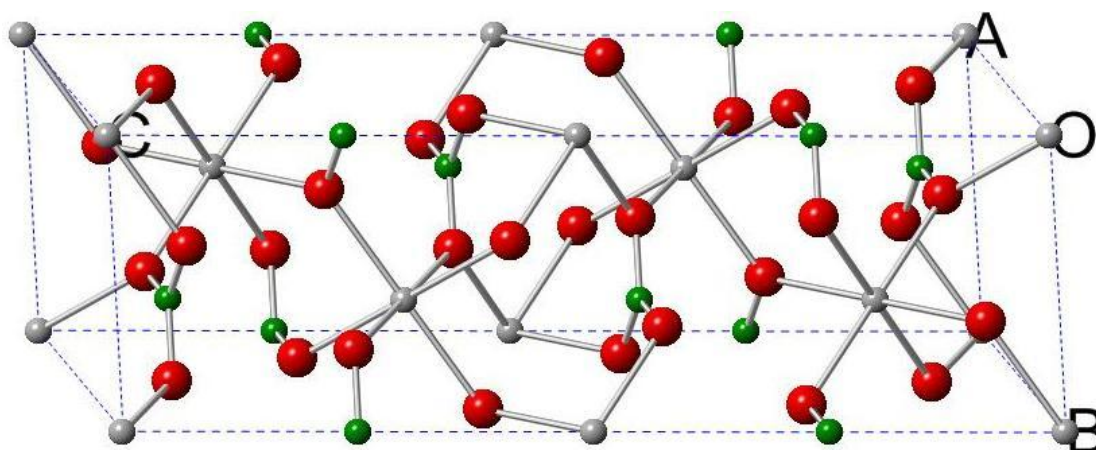
### Siderit

Krystalová soustava: klencová

Velikost elementární buňky:  $a = 4,689 \text{ \AA}$ ,  $b = 4,689 \text{ \AA}$ ,  $c = 15,37 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $293,17 \text{ \AA}^3$  [35]

Hustota:  $3,932 \text{ g/cm}^3$  [35]



Obr. 34: Struktura sideritu – použita CIF data [18]

Struktura: Vnitřní uspořádání sideritu je shodné s magnésitem. Uhličitanový anion je nezměněn, v šestičetné koordinaci s atomy kyslíku je železnatý kation, vzájemná vzdálenost je  $2,143 \text{ \AA}$  a úhel  $87,94^\circ$  nebo  $92,06^\circ$ . Každý atom kyslíku je koordinován se dvěma železnatými kationty a jedním atomem uhlíku. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty železa je  $3,727 \text{ \AA}$ , mezi nejbližšími atomy uhlíku je vzdálenost stejná.

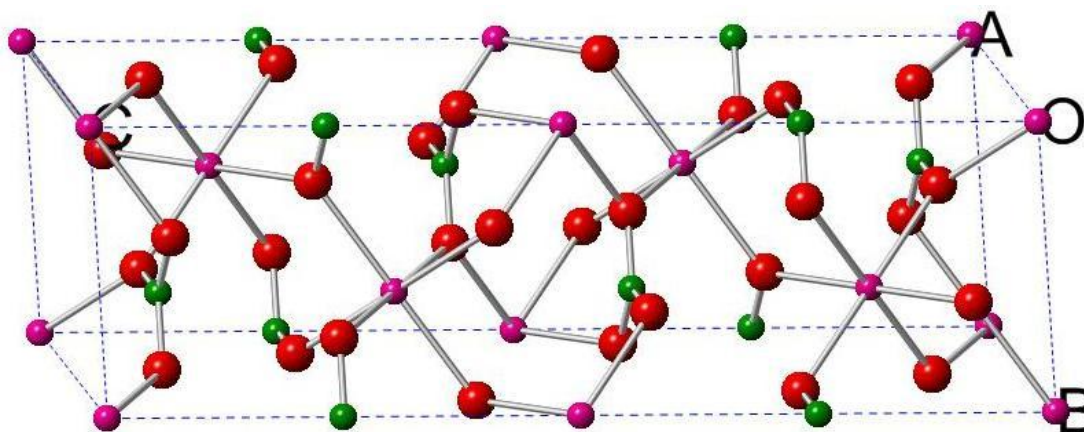
## Rodochrozit

Krystalová soustava: klencová

Velikost elementární buňky:  $a = 4,7771 \text{ \AA}$ ,  $b = 4,7771 \text{ \AA}$ ,  $c = 15,664 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $309,68 \text{ \AA}^3$  [36]

Hustota:  $3,7 \text{ g/cm}^3$  [36]



Obr. 35: Struktura rodochrozitu – použita CIF data [18]

Struktura: Vnitřní uspořádání rodochrozitu je shodné s magnesitem. Uhličitanový anion je nezměněn, v šestičetné koordinaci s atomy kyslíku je pak manganatý kation, vzájemná vzdálenost je  $2,196 \text{ \AA}$  a úhel  $88,27^\circ$  nebo  $91,73^\circ$ . Každý atom kyslíku je koordinován se dvěma manganatými kationty a jedním atomem uhlíku. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty manganu je  $3,798 \text{ \AA}$ , mezi nejbližšími atomy uhlíku je vzdálenost stejná.

## Shrnutí

Dle uvedených obrázků se jednotlivé struktury vizuálně jeví jako identické. Po prostudování dat je ale zřejmé, že jsou ve strukturách drobné odlišnosti například ve velikosti poloměru kationtů, v délce vazeb či velikosti svíraných úhlů. Všechny minerály krystalizují v klencové soustavě.

**Tab. 1: Izomorfní řada kalcitu**

	kalcit CaCO <sub>3</sub>	magnesit MgCO <sub>3</sub>	siderit FeCO <sub>3</sub>	rodochrozit MnCO <sub>3</sub>
<b>M<sub>r</sub> (g/mol)</b>	100,09	84,31	115,85	114,95
<b>Elementární buňka:</b>				
<b>a (nm)</b>	0,499	0,463	0,469	0,478
<b>c (nm)</b>	1,706	1,502	1,537	1,566
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,368	0,283	0,293	0,31
<b>ρ (g/cm<sup>3</sup>)</b>	2,711	3,01	3,932	3,7
<b>Vzdálenost kation-kyslík (nm)</b>	0,236	0,21	0,214	0,22
<b>Vzdálenost kation-kation (nm)</b>	0,405	0,366	0,373	0,38

### 3.2.2 Izomorfní řada aragonitu

Do této skupiny patří minerály aragonit (CaCO<sub>3</sub>), witherit (BaCO<sub>3</sub>), cerusit (PbCO<sub>3</sub>) a stroncianit (SrCO<sub>3</sub>). Faktor umožňující substituci je i v tomto případě geometrický faktor, což znamená, že symetrie minerálů je závislá na velikosti kationtu. Všechny kationty daných minerálů mají velikost větší než 1 Å. Co se velikosti kationtů týče, lze si všimnout, že kationty řady kalcitové jsou menší než v řadě aragonitové. Na následujících řádcích jsou popsány struktury tří zástupců, a to witheritu, cerusitu a stroncianitu. Aragonit je již popsán na straně 51.

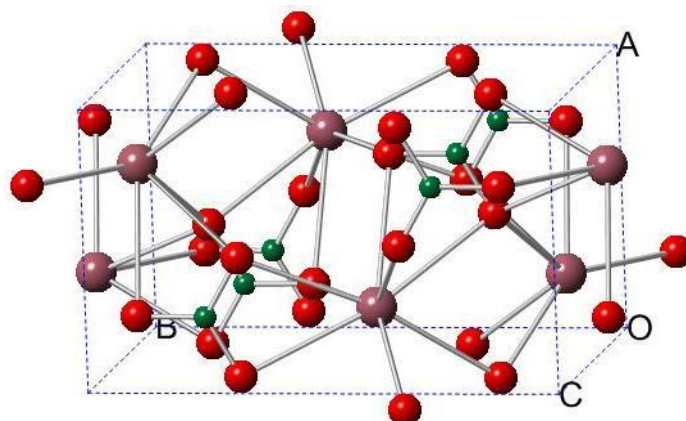
#### Witherit

Krystalová soustava: kosočtverečná

Velikost elementární buňky: a = 5,313 Å, b = 8,896 Å, c = 6,428 Å

Objem buňky: 303,88 Å<sup>3</sup> [37]

Hustota: 4,29 g/cm<sup>3</sup> [37]



Obr. 39: Struktura witeritu – použita CIF data [16]

Struktura: Základem je nepatrně deformovaný uhličitanový anion, který je tvořen atomem uhlíku, na který jsou navázány tři atomy kyslíku pod úhlem  $120,3^\circ$ ,  $119,4^\circ$  a  $120,3^\circ$  ve vzdálenostech 1,289 Å, 1,283 Å a 1,289 Å. V devítičetné nepravidelné koordinaci s těmito kyslíky je pak barnatý kation, vzájemná vzdálenost je dvakrát 2,742 Å, dvakrát 2,817 Å, dvakrát 2,836 Å, dvakrát 2,868 Å a jednou 2,737 Å. Každý atom kyslíku je koordinován se třemi barnatými kationty a jedním atomem uhlíku. Skupiny  $\text{CO}_3^{2-}$  jsou uspořádány do dvou typů vrstev, které se liší opačnou orientací aniontových skupin. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty barya je 4,369 Å a mezi nejbližšími atomy uhlíku 3,217 Å.

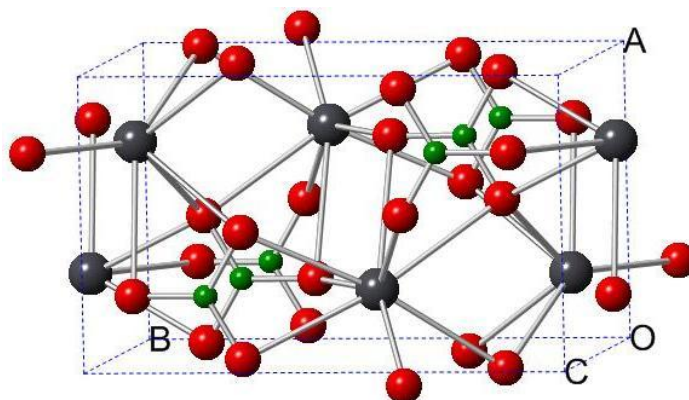
### Cerisit

Krystalová soustava: kosočtverečná

Velikost elementární buňky:  $a = 5,183 \text{ Å}$ ,  $b = 8,499 \text{ Å}$ ,  $c = 6,148 \text{ Å}$

Objem buňky:  $268,9 \text{ Å}^3$  [38]

Hustota:  $6,558 \text{ g/cm}^3$  [38]



Obr. 36: Struktura cerusitu – použita CIF data [39]



Struktura: Stejně jako u witheritu je základem nepatrně deformovaný uhličitanový anion, který je tvořen atomem uhlíku, na který jsou navázány tři atomy kyslíku pod úhlem  $119,99^\circ$ ,  $119,84^\circ$  a  $119,99^\circ$  ve vzdálenostech 1,281 Å, 1,29 Å a 1,281 Å. V devítičetné nepravidelné koordinaci s těmito kyslíky je pak olovnatý kation, vzájemná vzdálenost je dvakrát 2,781 Å, dvakrát 2,636 Å, dvakrát 2,726 Å, dvakrát 2,678 Å a jednou 2,597 Å. Každý atom kyslíku je koordinován se třemi olovnatými kationty a jedním atomem uhlíku. Skupiny  $\text{CO}_3^{2-}$  jsou uspořádány do dvou typů vrstev, které se liší opačnou orientací aniontových skupin. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty olova je 4,189 Å a mezi nejbližšími atomy uhlíku 3,075 Å.

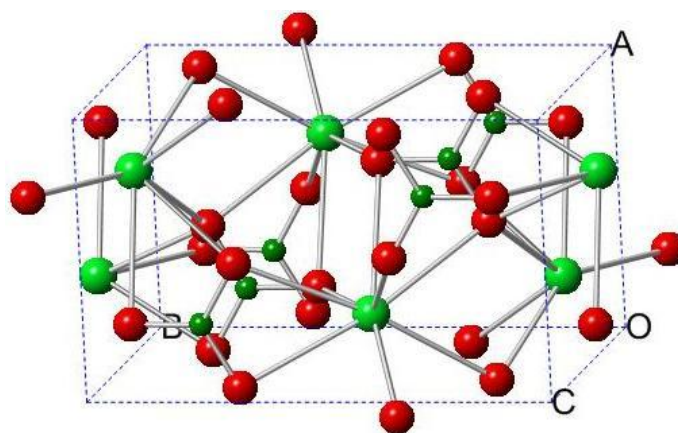
### Stroncianit

Krystalová soustava: kosočtverečná

Velikost elementární buňky:  $a = 5,09 \text{ Å}$ ,  $b = 8,358 \text{ Å}$ ,  $c = 5,997 \text{ Å}$

Objem buňky:  $258,2 \text{ Å}^3$  [40]

Hustota:  $3,722 \text{ g/cm}^3$  [40]



Obr. 37: Struktura stroncianitu – použita CIF data [16]

Struktura: Stejně jako u witheritu je základem nepatrně deformovaný uhličitanový anion, který je tvořen atomem uhlíku, na který jsou navázány tři atomy kyslíku pod úhlem  $120,28^\circ$ ,  $119,44^\circ$  a  $120,28^\circ$  ve vzdálenostech 1,293 Å, 1,27 Å a 1,293 Å. V devítičetné nepravidelné koordinaci s těmito atomy kyslíku je pak stroncnatý kation, vzájemná vzdálenost je dvakrát 2,725 Å, dvakrát 2,561 Å, dvakrát 2,634 Å, dvakrát 2,666 Å a jednou 2,552 Å. Každý atom kyslíku je koordinován se třemi stroncnatými kationty a jedním atomem uhlíku. Skupiny  $\text{CO}_3^{2-}$  jsou uspořádány do dvou typů vrstev,

které se liší opačnou orientací aniontových skupin. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty stroncia je 4,117 Å a mezi nejbližšími atomy uhlíku 3,003 Å.

## Shrnutí

Ve vnitřní struktuře daných minerálů lze najít jen malé odlišnosti (viz. Tab. 2). Všechny minerály krystalizují v kosočtverečné soustavě.

**Tab. 2: Izomorfní řada aragonitu**

	aragonit CaCO <sub>3</sub>	witherit BaCO <sub>3</sub>	cerusit PbCO <sub>3</sub>	stroncianit SrCO <sub>3</sub>
<b>M<sub>r</sub> (g/mol)</b>	100,09	197,34	267,21	147,63
<b>Elementární buňka:</b>				
<b>a (nm)</b>	0,496	0,531	0,518	0,509
<b>b (nm)</b>	0,797	0,89	0,85	0,836
<b>c (nm)</b>	0,574	0,643	0,615	0,6
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,226	0,304	0,269	0,258
<b>ρ (g/cm<sup>3</sup>)</b>	2,944	4,29	6,558	3,722
<b>Vzdálenost kation-kyslík (nm)</b>	0,242	0,274	0,26	0,255
	0,245	0,274	0,264	0,256
	0,252	0,282	0,268	0,263
	0,255	0,284	0,273	0,267
	0,265	0,287	0,278	0,273
<b>Vzdálenost kation-kation (nm)</b>	0,395	0,437	0,419	0,412

### 3.2.3 Spinelidy

Spinelidy (minerály skupiny spinelu) jsou oxidy tvořící izomorfní řady o obecném složení  $A^{+2}B^{+3}_2O_4$ , kde A = Mg, Fe, Zn, Ti, Co, Cu..., B = Al, Cr, Fe, Mn... Pro tyto minerály je tedy charakteristická široká izomorfie kationtů. Mezi běžné spinelidy patří spinel (MgAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>), magnetit (FeFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) či chromit (FeCr<sub>2</sub>O<sub>4</sub>). Mezi ty vzácnější pak hercynit (FeAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>), gahnit (ZnAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>) či franklinit (ZnFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub>). Na následujících řádcích jsou popsány struktury a vlastnosti prvních tří jmenovaných představitelů.



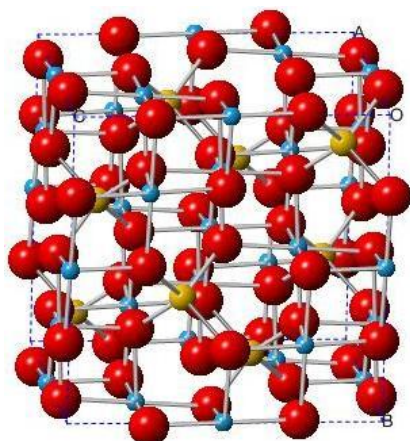
## Spinel

Krystalová soustava: krychlová

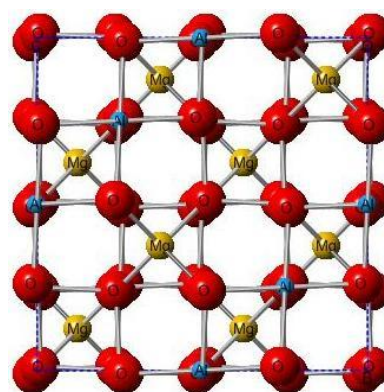
Velikost elementární buňky:  $a = 8,0844 \text{ \AA}$ ,  $b = 8,0844 \text{ \AA}$ ,  $c = 8,0844 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $529,44 \text{ \AA}^3$  [41]

Hustota:  $3,578 \text{ g/cm}^3$  [41]



Obr. 38: Struktura spinelu – použita CIF data [42]



Obr. 39: Struktura spinelu v řezu

Struktura: Spinel je tvořen oktaedry  $\text{AlO}_6$  a tetraedry  $\text{MgO}_4$ . Na každý hlinitý kation se tedy váže šest atomů kyslíku, které jsou umístěny ve vzdálenosti  $1,933 \text{ \AA}$ . Na hořečnatý kation se poté vážou čtyři atomy kyslíku, a to ve vzdálenosti  $1,911 \text{ \AA}$ . Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími hořečnatými kationty je  $3,501 \text{ \AA}$  a mezi nejbližšími hlinitými kationty  $2,858 \text{ \AA}$ .

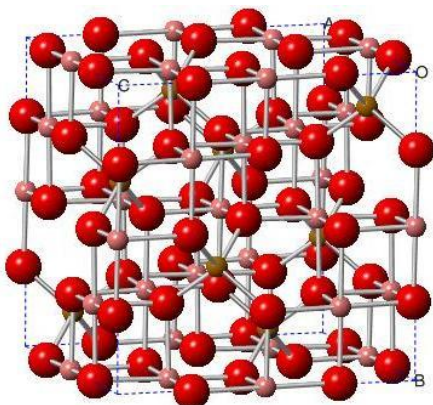
## Magnetit

Krystalová soustava: krychlová

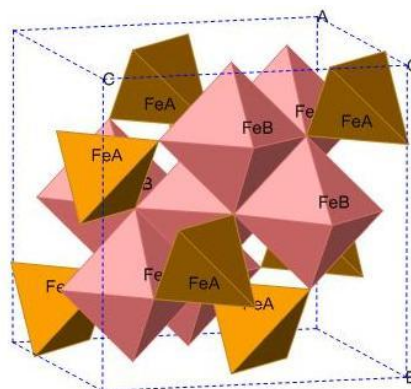
Velikost elementární buňky:  $a = 8,3958 \text{ \AA}$ ,  $b = 8,3958 \text{ \AA}$ ,  $c = 8,3958 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $592,07 \text{ \AA}^3$  [43]

Hustota:  $5,2 \text{ g/cm}^3$  [43]



Obr. 40: Struktura magnetitu – použita CIF data [44]



Obr. 41: Polyedry  $\text{FeO}_4$  a  $\text{FeO}_6$

Struktura: Magnetit je tvořen oktaedry  $\text{FeO}_6$  a tetraedry  $\text{FeO}_4$ . Oktaedr tvoří železitý kation s šesti atomy kyslíku ve vzdálenosti 2,06 Å. Tetraedr je tvořen železnatým kationtem se čtyřmi atomy kyslíku, které jsou ve vzdálenosti 1,886 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími železnatými kationty je 3,635 Å a mezi nejbližšími železitými kationty 2,968 Å.

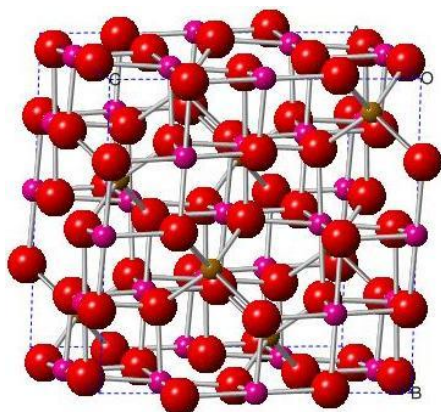
## Chromit

Krystalová soustava: krychlová

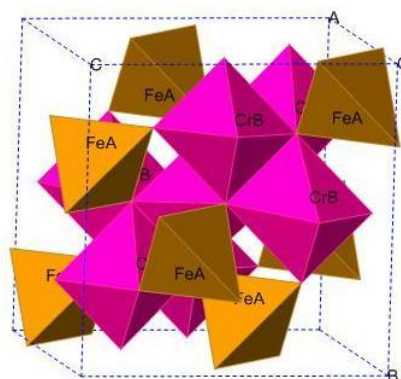
Velikost elementární buňky:  $a = 8,3765 \text{ Å}$ ,  $b = 8,3765 \text{ Å}$ ,  $c = 8,3765 \text{ Å}$

Objem buňky:  $580,93 \text{ Å}^3$  [45]

Hustota:  $5,12 \text{ g/cm}^3$  [45]



Obr. 42: Struktura chromitu – použita CIF data [46]



Obr. 43: Polyedry  $\text{FeO}_4$  a  $\text{CrO}_6$

Struktura: Chromit je tvořen oktaedry  $\text{CrO}_6$  a tetraedry  $\text{FeO}_4$ . Na každý chromitý kation se tedy váže šest atomů kyslíku, které jsou umístěny ve vzdálenosti 1,994 Å. Na železnatý kation se poté vážou čtyři atomy kyslíku, a to ve vzdálenosti 1,997 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími železnatými kationty je 3,627 Å a mezi nejbližšími chromitými kationty 2,962 Å.

## Shrnutí

Ve vnitřní struktuře daných minerálů lze najít jen malé odlišnosti, a to například ve velikosti poloměru kationtů či v délkách vazeb. Všechny minerály krystalizují v krychlové soustavě a jsou tvořeny dvojmocnými kationty, které tvoří tetraedry, a trojmocnými kationty, které tvoří oktaedry.

Tab. 3: Spinelidy

	spinel $\text{MgAl}_2\text{O}_4$	magnetit $\text{FeFe}_2\text{O}_4$	chromit $\text{FeCr}_2\text{O}_4$
<b><math>M_r</math> (g/mol)</b>	142,27	231,53	223,83
<b>Elementární buňka:</b>			
<b>a (nm)</b>	0,808	0,84	0,838
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,529	0,592	0,581
<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	3,578	5,2	5,12
<b>Vzdálenost:</b>			
<b>Dvojmocný kation-kyslík (nm)</b>	0,191	0,189	0,2
<b>Trojmocný kation-kyslík (nm)</b>	0,193	0,206	0,199
<b>Dvojmocný kation-kation (nm)</b>	0,35	0,364	0,363
<b>Trojmocný kation-kation (nm)</b>	0,286	0,297	0,296

### 3.2.4 Skalice se stejným počtem vod – řada starkeyitu

Do této řady patří minerály s obecným vzorcem  $\text{A}^{+2}\text{SO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ , kde A = Mn, Mg, Zn, Fe nebo Co. Pro minerály jsou charakteristické příměsi. Patří sem například starkeyit ( $\text{MgSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ), boyleit ( $\text{ZnSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ), ilesit ( $\text{MnSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ) či rozenit ( $\text{FeSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ ).

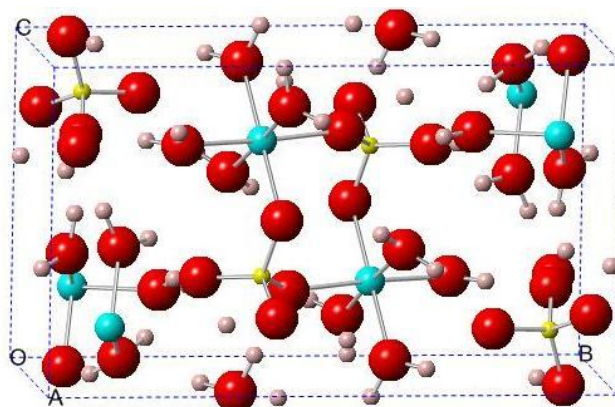
## Starkeyit

Krystalová soustava: jednoklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 5,922 \text{ \AA}$ ,  $b = 13,604 \text{ \AA}$ ,  $c = 7,905 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $636,78 \text{ \AA}^3$  [47]

Hustota:  $2,007 \text{ g/cm}^3$  [47]



Obr. 44: Struktura starkeyitu – použita CIF data [48]

Struktura: Starkeyit je tvořen deformovanými oktaedry  $\text{MgO}_6$  a tetraedry  $\text{SO}_4$ . Hořečnatý kation je obklopen čtyřmi vodami ve vzdálenostech  $2,052 \text{ \AA}$ ,  $2,072 \text{ \AA}$ ,  $2,073 \text{ \AA}$  a  $2,087 \text{ \AA}$  a přes dva atomy kyslíku vzdálené  $2,083 \text{ \AA}$  je spojen se sírany. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími hořečnatými kationty je  $4,551 \text{ \AA}$ .

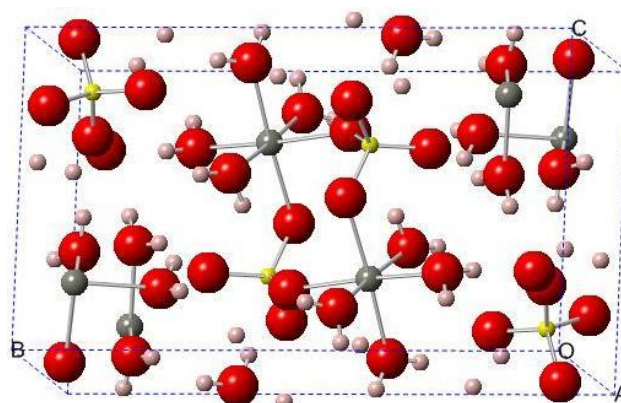
## Boyleit

Krystalová soustava: jednoklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 5,904 \text{ \AA}$ ,  $b = 13,519 \text{ \AA}$ ,  $c = 7,883 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $642,22 \text{ \AA}^3$  [49]

Hustota:  $2,41 \text{ g/cm}^3$  [50]



Obr. 49: Struktura boyleitu – použita CIF data [51]

Struktura: Boyleit je tvořen deformovanými oktaedry  $\text{ZnO}_6$  a tetraedry  $\text{SO}_4$ . Zinečnatý kation je obklopen čtyřmi vodami ve vzdálenostech 2,079 Å, 2,083 Å, 2,089 Å a 2,101 Å a přes dva atomy kyslíku vzdálené 2,113 Å je spojen se sírou. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími zinečnatými kationty je 4,509 Å.

Tab. 4: Skalice se stejným počtem vod – řada starkeyitu

	starkeyit $\text{MgSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	boyleit $\text{ZnSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$
<b><math>M_r</math> (g/mol)</b>	192,43	233,51
<b>Elementární buňka:</b>		
<b>a (nm)</b>	0,592	0,59
<b>b (nm)</b>	1,36	1,352
<b>c (nm)</b>	0,79	0,788
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,637	0,642
<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	2,007	2,41
<b>Vzdálenost:</b>		
<b>Kation-kyslík sousedící se sírou (nm)</b>	0,208	0,211
<b>Kation-kation (nm)</b>	0,455	0,451

### 3.2.5 Skalice se stejným počtem vod – řada chalkantitu

Do této řady patří minerály s obecným vzorcem  $A^{+2}SO_4 \cdot 5H_2O$ , kde  $A = Mn, Mg, Cu$  nebo  $Fe$ . Pro minerály jsou charakteristické příměsi. Patří sem například chalkantit ( $CuSO_4 \cdot 5H_2O$ ), pentahydrít ( $MgSO_4 \cdot 5H_2O$ ) či siderotil ( $FeSO_4 \cdot 5H_2O$ ).

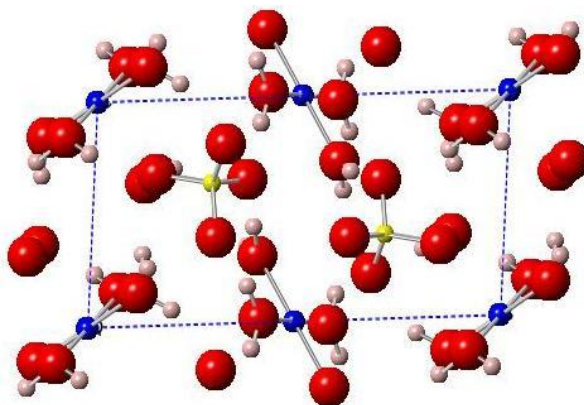
#### Chalkantit (modrá skalice)

Krystalová soustava: trojklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 6,141 \text{ \AA}$ ,  $b = 10,736 \text{ \AA}$ ,  $c = 5,986 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $361,03 \text{ \AA}^3$  [52]

Hustota:  $2,282 \text{ g/cm}^3$  [52]



Obr. 45: Struktura chalkantitu – použita CIF data [53]

Struktura: Chalkantit je tvořen tetraedry  $SO_4$  a měďnatými kationty, které jsou ve struktuře uspořádány dvěma způsoby. Pokaždé jsou obklopeny čtyřmi vodami, a to v prvním případě ve vzdálenosti dvakrát  $1,975 \text{ \AA}$  a dvakrát  $1,977 \text{ \AA}$  a v případě druhém ve vzdálenosti dvakrát  $1,945 \text{ \AA}$  a dvakrát  $1,97 \text{ \AA}$ . Pátá voda se nachází v prostoru mezi sírany. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími měďnatými kationty je  $5,986 \text{ \AA}$ .

#### Pentahydrít

Krystalová soustava: trojklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 6,314 \text{ \AA}$ ,  $b = 10,505 \text{ \AA}$ ,  $c = 6,03 \text{ \AA}$

Objem buňky:  $367,08 \text{ \AA}^3$  [54]

Hustota:  $1,9 \text{ g/cm}^3$  [55]



Struktura: Vnitřní struktura pentahydritu odpovídá vnitřní struktuře chalkantitu. Drobné rozdíly jsou pouze ve vzdálenostech a změně kationtu. Čtyři vody, které obklopují hořečnatý kation, jsou ve vzdálenosti dvakrát 2,038 Å a dvakrát 2,046 Å a v druhém případě ve vzdálenosti dvakrát 2,059 Å a dvakrát 2,091 Å. Dva nejbližší hořečnaté kationty jsou od sebe vzdáleny 6,03 Å.

**Tab. 5: Skalice se stejným počtem vod – řada chalkantitu**

	chalkantit $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	pentahydrít $\text{MgSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$
<b><math>M_r</math> (g/mol)</b>	249,69	210,45
<b>Elementární buňka:</b>		
<b>a (nm)</b>	0,614	0,631
<b>b (nm)</b>	1,074	1,051
<b>c (nm)</b>	0,599	0,603
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,361	0,367
<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	2,282	1,9
<b>Vzdálenost:</b>		
<b>Kation-kation (nm)</b>	0,599	0,603

### 3.2.6 Skalice se stejným počtem vod – řada hexahydrítu

Do této řady patří minerály s obecným vzorcem  $A^{+2}\text{SO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , kde  $A = \text{Mn}, \text{Mg}, \text{Co}, \text{Fe}, \text{Ni}$  nebo  $\text{Zn}$ . Pro minerály jsou charakteristické příměsi. Patří sem například hexahydrít ( $\text{MgSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ), niklhexahydrít ( $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ) či ferrohexahydrít ( $\text{FeSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ).

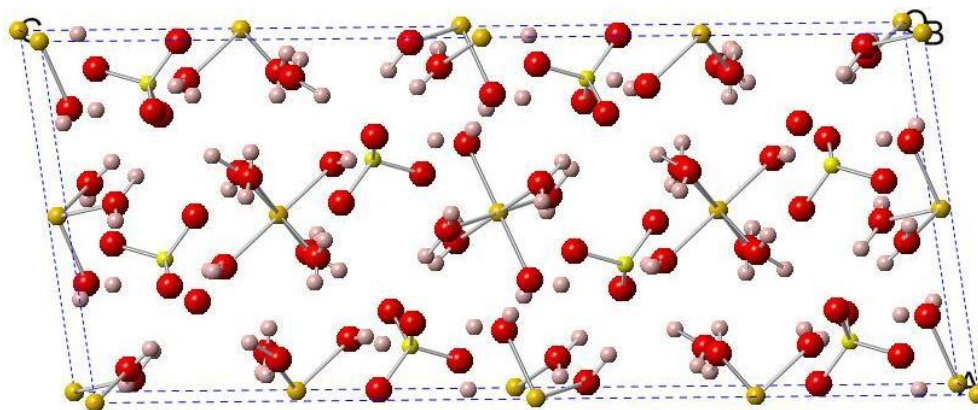
#### Hexahydrít

Krystalová soustava: jednoklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 10,11 \text{ Å}$ ,  $b = 7,212 \text{ Å}$ ,  $c = 24,41 \text{ Å}$

Objem buňky:  $1762,94 \text{ Å}^3$  [56]

Hustota:  $1,745 \text{ g/cm}^3$  [56]



**Obr. 46: Struktura hexahydritu – použita CIF data [57]**

Struktura: Hexahydrit je tvořen tetraedry  $\text{SO}_4$  a hořečnatými kationty, kolem kterých je oktaedricky uspořádáno šest vod. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími hořečnatými kationty je 6,117 Å.

### **Niklhexahydrit**

Krystalová soustava: jednoklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 9,88 \text{ Å}$ ,  $b = 7,228 \text{ Å}$ ,  $c = 24,13 \text{ Å}$

Objem buňky:  $1729,32 \text{ Å}^3$  [58]

Hustota:  $2,07 \text{ g/cm}^3$  [59]

Struktura: Vnitřní struktura niklhexahydritu odpovídá vnitřní struktuře hexahydritu. Drobné rozdíly jsou pouze ve vzdálenostech a změně kationtu. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími nikelnatými kationty je 6,043 Å.



Tab. 6: Skalice se stejným počtem vod – řada hexahydrítu

	hexahydrít $\text{MgSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	niklhexahydrít $\text{NiSO}_4 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
$M_r$ (g/mol)	228,46	262,85
<b>Elementární buňka:</b>		
a (nm)	1,011	0,988
b (nm)	0,721	0,723
c (nm)	2,441	2,413
V (nm <sup>3</sup> )	1,763	1,729
$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	1,745	2,07
<b>Vzdálenost:</b>		
Kation-kation (nm)	0,612	0,604

### 3.2.7 Tuttonovy soli

Do této řady patří minerály s obecným vzorcem  $\text{A}^{+1}_2\text{B}^{+2}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ , kde A = K, Rb, Cs,  $\text{NH}_4$  a B = Mg, Cu, Co, Zn, Mn atd. Synteticky lze vyrobit nespočet variant Tuttonových solí, níže jsou popsáni tři zástupci, a to mohrit  $[(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$ , pikromerit  $[\text{K}_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$  a cyanochroit  $[\text{K}_2\text{Cu}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$ .

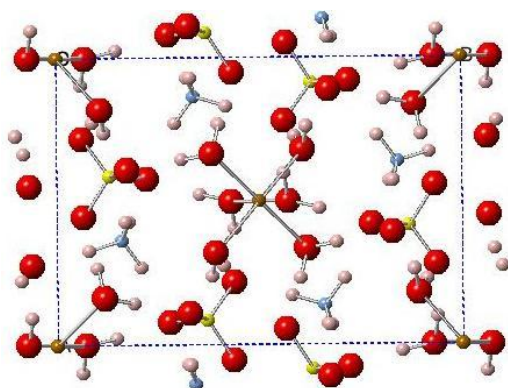
#### Mohrit

Krystalová soustava: jednoklonná

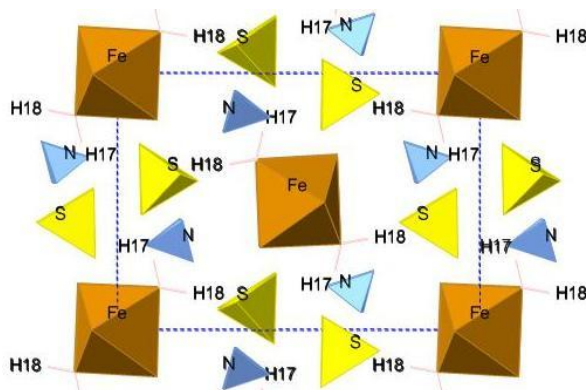
Velikost elementární buňky: a = 9,167 Å, b = 12,405 Å, c = 6,305 Å

Objem buňky: 704,32 Å<sup>3</sup> [60]

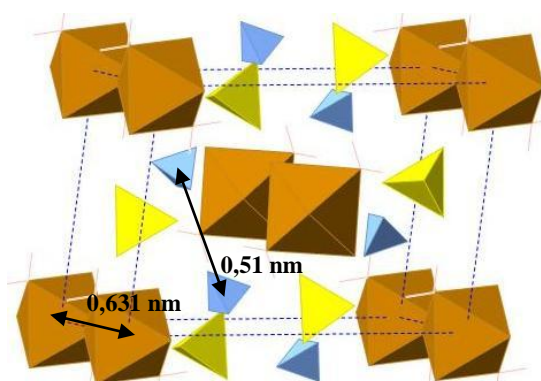
Hustota: 1,838 g/cm<sup>3</sup> [60]



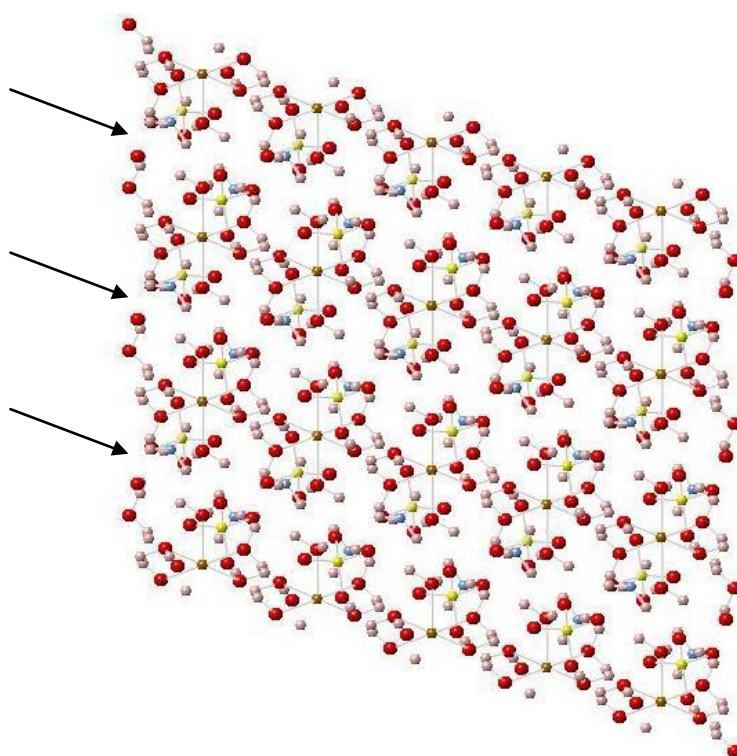
Obr. 47: Struktura mohritu – použita CIF data [61]



Obr. 48: Mohrit – polyedry



Obr. 49: Vzdálenosti ve struktuře



Obr. 50: Mohrit – skluzové roviny

Struktura: Mohrit je tvořen oktaedry  $\text{MgO}_6$ , tetraedry  $\text{NO}_4$  a tetraedry  $\text{SO}_4$ . Voda je v oktaedrickém uspořádání okolo železnatého kationtu, nejbližší atom kyslíku je od něj vzdálen 2,1 Å. Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími atomy dusíku je 5,102 Å a mezi nejbližšími kationty železnatými 6,305 Å.

### **Pikromerit**

Krystalová soustava: jednoklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 9,072 \text{ Å}$ ,  $b = 12,212 \text{ Å}$ ,  $c = 6,113 \text{ Å}$

Objem buňky:  $656,75 \text{ Å}^3$  [62]

Hustota:  $2,039 \text{ g/cm}^3$  [62]

Struktura: Pikromerit je tvořen polyedry  $\text{KO}_8$ , deformovanými oktaedry  $\text{MgO}_6$  a tetraedry  $\text{SO}_4$ . Koordinace kolem alkalického iontu je nepravidelná. Voda je v oktaedrickém uspořádání okolo hořečnatého kationtu, nejbližší atom kyslíku je od něj vzdálen  $2,051 \text{ Å}$ . Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty draselnými je  $5,069 \text{ Å}$  a mezi nejbližšími kationty hořečnatými  $6,113 \text{ Å}$ .

### **Kyanochroit**

Krystalová soustava: jednoklonná

Velikost elementární buňky:  $a = 9,066 \text{ Å}$ ,  $b = 12,13 \text{ Å}$ ,  $c = 6,149 \text{ Å}$

Objem buňky:  $660,35 \text{ Å}^3$  [63]

Hustota:  $2,224 \text{ g/cm}^3$  [63]

Struktura: Kyanochroit je minerál strukturně odpovídající pikromeritu. Nejbližší atom kyslíku je od měďnatého kationtu vzdálen  $1,944 \text{ Å}$ . Vzdálenost mezi dvěma nejbližšími kationty draselnými je  $4,982 \text{ Å}$  a mezi nejbližšími kationty měďnatými  $6,149 \text{ Å}$ .

**Tab. 7: Tuttonovy soli**

	<b>mohrit</b> $(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	<b>pikromerit</b> $\text{K}_2\text{Mg}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	<b>kyanochroit</b> $\text{K}_2\text{Cu}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
<b><math>M_r</math> (g/mol)</b>	392,14	402,72	441,96
<b>Elementární buňka:</b>			
<b>a (nm)</b>	0,917	0,907	0,907
<b>b (nm)</b>	1,241	1,221	1,213
<b>c (nm)</b>	0,631	0,611	0,615
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,704	0,657	0,66
<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1,838	2,039	2,224
<b>Vzdálenost:</b>			
<b>Jednomocný kation-kation (nm)</b>	0,51	0,507	0,498
<b>Dvojmocný kation-kation (nm)</b>	0,631	0,611	0,615
<b>Dvojmocný kation-kyslík (nm)</b>	0,21	0,205	0,194

#### Štěpnost:

Jak je z Obr. 55 patrné, Tuttonovy soli se skládají z vrstev, které jsou vzájemně přitahovány slabšími silami. Na struktuře mohritu jsou jasně viditelné skluzové roviny, podél kterých se minerál štěpí.

#### 3.2.8 Skalice se stejným počtem vod – řada melanteritu

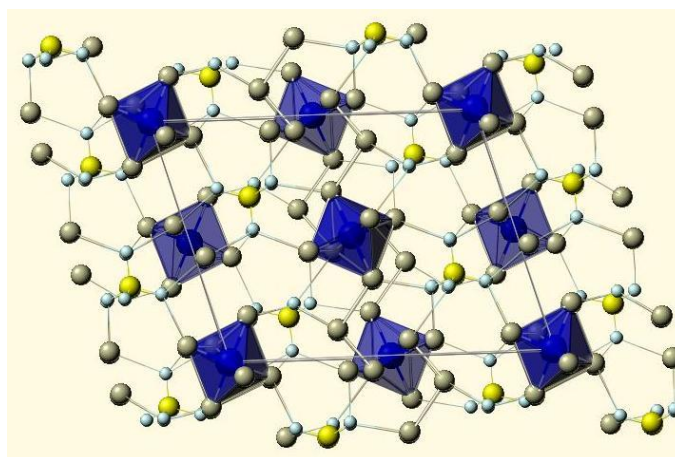
Do této řady patří minerály s obecným vzorcem  $\text{A}^{+2}\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ , kde  $\text{A} = \text{Cu}, \text{Zn}, \text{Co}, \text{Fe}$  nebo například  $\text{Mg}$ . Pro minerály jsou charakteristické příměsi. Patří sem například melanterit ( $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ), alpersit  $[(\text{Mg}, \text{Cu})\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}]$  nebo bieberit ( $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ).

V případě této řady nelze bohužel stáhnout plnohodnotné CIF informace, v databázi webmineral.com je však znázorněna vnitřní struktura krystalů pomocí appletu jPOWD (prohlížeče, který lze umístit na webové stránky). Obrázkem je možné otáčet a měnit zobrazení. Je tedy možné strukturní uspořádání podrobně studovat bez možnosti měření vzdáleností.

**Tab. 8: Skalice se stejným počtem vod – řada melanteritu**

	melanterit ( $\text{FeSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ )	alpersit [(Mg, Cu) $\text{SO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ ]	bieberit ( $\text{CoSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$ )
<b><math>M_r</math> (g/mol)</b>	278,02	262,74	281,1
<b>Elementární buňka:</b>			
<b>a (nm)</b>	1,411	1,417	1,413
<b>b (nm)</b>	0,651	0,653	0,655
<b>c (nm)</b>	1,102	1,084	1,1
<b>V (nm<sup>3</sup>)</b>	0,977	0,965	0,983
<b><math>\rho</math> (g/cm<sup>3</sup>)</b>	1,89	1,82	1,9

Poznámka k Tab. 8: Informace o hustotách získány z [64].



**Obr. 51: Struktura melanteritu [65]**

### Shrnutí:

Všechny minerály krystalizují v jednoklonné soustavě. Struktura je tvořena tetraedry  $\text{SO}_4$  a dvojjaznými kationty, kolem kterých je oktaedricky uspořádáno šest vod. Sedmá voda se nachází v prostoru mezi sírany.

## ZÁVĚR

Cílem bakalářské práce bylo prostudování programu Atoms V6.3 a dalších pěti volně dostupných programů pro vizualizaci vnitřní struktury krystalů. Druhým cílem bylo řešení otázek vnitřní struktury krystalů anorganických látek pomocí vizualizačních počítačových programů.

V teoretické části jsem se hlavně zaměřila na popis obrazového materiálu a zahraničních mineralogických databází, ze kterých lze získat CIF data. Ta se poté vkládají do výše zmiňovaných vizualizačních programů, kde se s nimi dále pracuje.

Experimentální část slouží jako stručný návod k jednotlivým programům. U každého programu je popsán způsob jeho získání z webových stránek, systémové požadavky, návod k základním funkcím doplněný o obrázek s popisem, podporované vstupní a výstupní formáty a jeho výhody a nevýhody. Některé z programů nabízí nespočet funkcí a působí velmi složitě. Pro účely vizualizace vnitřní stavby krystalů tak, jak požaduje tato bakalářská práce, nebylo ovšem nutné popisovat všechny detaily, důraz byl kladen hlavně na stručnost a srozumitelnost. Veškeré podklady až na software Jmol byly v anglickém jazyce. V rámci experimentální části byly jednotlivé funkce přeloženy a popsány v českém jazyce.

V praktické části je práce zaměřena na změny vnitřní struktury týkající se polymorfie a izomorfie. Tyto dva jevy byly vybrány proto, že se na nich nejlépe interpretují rozdíly a podobnosti ve struktuře látek se stejnými (polymorfie) nebo odlišnými (izomorfie) vzorci. Jednotlivé obrázky přesně ukazují vnitřní uspořádání struktur – pozici atomů, vazby atd. Vše je navíc doplněno číselnými informacemi, takže lze podobné struktury vzájemně porovnat a jasně vidět jejich odlišnosti. Z obrázků je možné pochopit nejružnější vlastnosti látek. Pozorování jsou vždy shrnuta v závěru každé podkapitoly.

Jako příklad toho, co nám vizualizace krystalu může odhalit, je štěpnost. Štěpnost grafitu je dle Obr. 21 zcela zřejmá. Grafit je složen z vrstev, které jsou vzájemně přitahovány pouze slabými Van der Waalsovými silami. Podél těchto vrstev se tedy snadno štípe a zanechává na papíře stopu. K podobné úvaze můžeme dojít i u dalších minerálů. Při zobrazení kalcitu na Obr. 26 lze taktéž pozorovat jednotlivé vrstvy. U Tuttonových solí se naskytne podobný pohled, na struktuře mohritu

$[(\text{NH}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}]$  na Obr. 55 jsou zřetelně viditelné skluzové roviny. Jasně jsme tedy pouhým okem bez dalších informací o struktuře schopni odhadnout, zda v jejím případě lze či nelze mluvit o štěpnosti.

Dalším příkladem je pozorování izomorfie, konkrétně u řady aragonitu ( $\text{CaCO}_3$ ). Sem patří dále i například witherit ( $\text{BaCO}_3$ ) či cerusit ( $\text{PbCO}_3$ ). Všechny struktury minerálů se na první pohled jeví jako identické. Až po bližším prostudování je jasné, že zde drobné odchylky jsou a vzdálenosti ve strukturách se mírně odlišují. Důvodem je změna kationtu. Ten ale splňuje tu podmínku, že se jeho velikost od ostatních mění jen v řádu několika procent. Všechny kationty jsou navíc vždy větší než 1 Å. Kdyby byla odchylka ve velikosti kationtu větší, podmínka by tím byla porušena a k izomerii (vzájemnému zastupování kationtů) by tedy nemohlo dojít.

Dalo by se říci, že vizualizace anorganických struktur odhaluje tajemná zákoutí jejich vnitřního uspořádání a rozšiřuje možnosti jak na ně nahlížet. Stačí se podívat na obyčejný chemický vzorec  $\text{CaCO}_3$ . V případě vnitřního uspořádání máme dvě možnosti, jak tuto sloučeninu pojmenovat – kalcit nebo aragonit. Pokud si strukturu nezobrazíme, tak nikdy neuvidíme, že se jedná o dva jinak uspořádané minerály, které se navíc liší svými vlastnostmi.

Vizualizace struktury anorganických látek je velmi přínosnou metodou, jak látky detailně prozkoumat a udělat si představu o jejich reálném vnitřním uspořádání. Práce s počítačem a nejrůznějšími programy je navíc v dnešní době nejen samozřejmostí, ale i nezbytností.

Bakalářská práce splnila všechny body zadání.

## SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] BÍLEK, M. *Vybrané aspekty vizualizace učiva přírodovědných předmětů: Obrazový materiál - možnosti a meze jeho využití ve výuce (chemie)*. Vyd. 1. Hradec Králové: Miloš Vognar - M&V, 2007. 180 s. ISBN 80-86771-21-0.
- [2] HALL, S. R.; ALLEN, F. H.; BROWN, I. D. The crystallographic information file (CIF): A new standard archive file for crystallography. *Acta Crystallographica* [online]. 1991, 6, s. 655-685. Dostupný také z WWW: <<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?pii=S010876739101067X>>.
- [3] SINHA, A. K. *Geoinformatics: Data to knowledge* [online]. Colorado: Geological Society of America, 2006 [cit. 2011-06-23]. Building the American Mineralogist Crystal Structure Database: A recipe for construction of a small Internet database, s. 74. Dostupné z WWW: <[http://books.google.cz/books?id=OHbGKCsZbwQC&pg=PA74&lpg=PA74&dq=number+of+datasets+in+american+mineralogist+structure&source=bl&ots=t-RU8ofBcE&sig=VEtC\\_TfZHZafu8J1VBTrHUQywps&hl=cs&ei=KJCCTbeVMYjOswaJ5tmlAw&sa=X&oi=book\\_result&ct=result&resnum=5&ved=0CDwQ6AEwBA#v=onepage&q&f=false](http://books.google.cz/books?id=OHbGKCsZbwQC&pg=PA74&lpg=PA74&dq=number+of+datasets+in+american+mineralogist+structure&source=bl&ots=t-RU8ofBcE&sig=VEtC_TfZHZafu8J1VBTrHUQywps&hl=cs&ei=KJCCTbeVMYjOswaJ5tmlAw&sa=X&oi=book_result&ct=result&resnum=5&ved=0CDwQ6AEwBA#v=onepage&q&f=false)>.
- [4] CLARK, C. M.; DOWNS, R. T. Using the American Mineralogist Crystal Structure Database in the Classroom. *Journal of Geoscience Education*. 2004, 1, s. 76-80. Dostupný také z WWW: <[http://www.geo.arizona.edu/xtal/group/pdf/JGE51\\_76.pdf](http://www.geo.arizona.edu/xtal/group/pdf/JGE51_76.pdf)>.
- [5] *Science Software* [online]. c2005 [cit. 2011-06-23]. File Formats Supported. Dostupné z WWW: <[http://www.sciencesoftware.com/ffs\\_shapesw.htm](http://www.sciencesoftware.com/ffs_shapesw.htm)>.
- [6] *Slide Share* [online]. c2011 [cit. 2011-06-23]. Mineralogie jmol. Dostupné z WWW: <<http://www.slideshare.net/kchtul/mineralogie-jmol>>.
- [7] CHVÁTAL, M. *Úvod do mineralogie* [online]. c2002 [cit. 2011-06-23]. Polymorfie. Dostupné z WWW: <<http://www.museum.mineral.cz/mineraly/ucebnice/index1.php>>.



- [8] VÁVRA, V.; LOSOS, Z. *Multimediální studijní texty z mineralogie pro bakalářské studium* [online]. 2006 [cit. 2011-06-23]. Reálné krystalové struktury a jejich vlastnosti. Dostupné z WWW: <[http://www.sci.muni.cz/mineralogie/kap\\_1\\_8\\_struktura/kap\\_1\\_8\\_struktura.htm#1.8.4.](http://www.sci.muni.cz/mineralogie/kap_1_8_struktura/kap_1_8_struktura.htm#1.8.4.)>
- [9] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-23]. Graphite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-1740.html>>.
- [10] LUKESH, J. S.; PAULING, L. The problem of the graphite structure. *American Mineralogist*. Chantilly: Mineralogical Society of America, 1950. s. 125.
- [11] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-23]. Diamond. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-1282.html>>.
- [12] HOM, T.; KISZENIK, W.; POST, B. Accurate lattice constants from multiple reflection measurements. II. Lattice constants of germanium silicon and diamond. *Journal of Applied Crystallography*. 1975, 4, s. 457-458. Dostupný také z WWW: <<http://journals.iucr.org/j/issues/1975/04/00/a12735/a12735.pdf>>.
- [13] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-23]. Lonsdaleite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-2431.html>>.
- [14] BUNDY, F. P.; KASPER, J. S. Hexagonal Diamond - A New Form of Carbon. *Journal of Chemical Physics*. 1966, 9, s. 3437-3447. Dostupný také z WWW: <<http://link.aip.org/link/?JCP/46/3437/1&Agg=doi>>.
- [15] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-23]. Aragonite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-307.html>>.
- [16] DE VILLIERS, D. P. R. Crystal structures of aragonite, strontianite and witherite. *American Mineralogist*. 1971, 56, s. 758-767. Dostupný také z WWW: <[http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol56/AM56\\_758.pdf](http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol56/AM56_758.pdf)>.
- [17] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-23]. Calcite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-859.html>>.

- [18] GRAF, D. L. Crystallographic tables for the rhombohedral carbonates. *American Mineralogist*. 1961, 46, s. 1283-1316. Dostupný také z WWW: <<http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/hom/calcite.pdf>>.
- [19] CHVÁTAL, M. *Úvod do mineralogie* [online]. c2002 [cit. 2011-06-23]. Aragonit. Dostupné z WWW: <[http://www.museum.mineral.cz/mineraly/ucebnice/system\\_min/aragonit.php](http://www.museum.mineral.cz/mineraly/ucebnice/system_min/aragonit.php)>.
- [20] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-23]. Quartz. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3337.html>>.
- [21] LEVIEN, L.; PREWITT, C. T.; WEIDNER, D. J. Structure and elastic properties of quartz at pressure  $P = 1$  atm. *American Mineralogist*. 1980, 65, s. 920-930. Dostupný také z WWW: <[http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol65/AM65\\_920.pdf](http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol65/AM65_920.pdf)>.
- [22] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Tridymite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-4015.html>>.
- [23] KONNERT, J. H.; APPLEMAN, D. E. The crystal structure of low tridymite. *Acta Crystallographica Section B: Structural Crystallography and Crystal Chemistry*. 1978, 34, 2, s. 391-403. Dostupný také z WWW: <<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?a15782>>.
- [24] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Cristobalite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-1155.html>>.
- [25] DOWNS, R. T.; PALMER, D. C. The pressure behavior of alpha cristobalite. *American Mineralogist*. 1994, 79, s. 9-14. Dostupný také z WWW: <[http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol79/AM79\\_9.pdf](http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol79/AM79_9.pdf)>.
- [26] *Geologická encyklopedie* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Křemen. Dostupné z WWW: <<http://www.geology.cz/aplikace/encyklopedie/term.pl?kremen>>.
- [27] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Rutile. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3486.html>>.

- [28] MEAGHER, E. P.; LAGER, G. A. Polyhedral thermal expansion in the TiO<sub>2</sub> polymorphs: Refinement of the crystal structure of rutile and brookite at high temperature. *The Canadian Mineralogist*. 1979, 17, s. 77-85. Dostupný také z WWW: <[http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/cm/vol17/CM17\\_77.pdf](http://rruff.geo.arizona.edu/doclib/cm/vol17/CM17_77.pdf)>.
- [29] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Brookite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-787.html>>.
- [30] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Anatase. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-213.html>>.
- [31] PARKER, R. Zur Kristallstruktur von Anastas und Rutil: II. Teil. Die Anastasstruktur. *Zeitschrift für Kristallographie*. 1924, 59, s. 1-54.
- [32] CHVÁTAL, M. *Úvod do mineralogie* [online]. c2002 [cit. 2011-06-23]. Izomorfie. Dostupné z WWW: <<http://www.museum.mineral.cz/mineraly/ucebnice/index1.php>>.
- [33] VÁVRA, V.; LOSOS, Z. *Multimediální studijní texty z mineralogie pro bakalářské studium* [online]. 2006 [cit. 2011-06-23]. Úvod do systematické mineralogie. Dostupné z WWW: <[http://www.sci.muni.cz/mineralogie/kap\\_7\\_1\\_uvod/kap\\_7\\_1\\_uvod.htm#7.1.2.1.](http://www.sci.muni.cz/mineralogie/kap_7_1_uvod/kap_7_1_uvod.htm#7.1.2.1.)>
- [34] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Magnesite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-2482.html>>.
- [35] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Siderite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3647.html>>.
- [36] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Rhodochrosite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3406.html>>.
- [37] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Witherite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-4299.html>>.
- [38] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Cerussite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-934.html>>.

- [39] ANTAO, S. M.; HASSAN, I. The orthorhombic structure of  $\text{CaCO}_3$ ,  $\text{SrCO}_3$ ,  $\text{PbCO}_3$  and  $\text{BaCO}_3$ : Linear structural trends. *The Canadian Mineralogist*. 2009, 47, s. 1245-1255.
- [40] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Strontianite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3805.html>>.
- [41] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Spinel. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3729.html>>.
- [42] PETERSON, R. C.; LAGER, G. A.; HITTERMAN, R. L. A time-of-flight neutron powder diffraction study of  $\text{MgAl}_2\text{O}_4$  at temperatures up to 1273 K. *American Mineralogist*. 1991, 76, s. 1455-1485. Dostupný také z WWW: <[http://truff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol76/AM76\\_1455.pdf](http://truff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol76/AM76_1455.pdf)>.
- [43] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Magnetite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-2538.html>>.
- [44] WECHSLER, B. A.; LINDSLEY, D. H.; PREWITT, C. T. Crystal structure and cation distribution in titanomagnetites ( $\text{Fe}_{3-x}\text{Ti}_x\text{O}_4$ ). *American Mineralogist*. 1984, 69, s. 754-770. Dostupný také z WWW: <[http://truff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol69/AM69\\_754.pdf](http://truff.geo.arizona.edu/doclib/am/vol69/AM69_754.pdf)>.
- [45] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Chromite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-1036.html>>.
- [46] LENAŽ, D., et al. Structural changes and valence states in the  $\text{MgCr}_2\text{O}_4$ - $\text{FeCr}_2\text{O}_4$  solid solution series. *Physics and Chemistry of Minerals*. 2004, 31, s. 633-642.
- [47] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Starkeyite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3752.html>>.
- [48] BAUR, W. H. On the crystal chemistry of salt hydrates. II. A neutron diffraction study of  $\text{MgSO}_4 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$ . *Acta Crystallographica*. July 1964, 17, 7, s. 863-869. Dostupný také z WWW: <<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?a04272>>.
- [49] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Boyleite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-746.html>>.

- [50] *Geography Dictionary* [online]. c2008 [cit. 2011-06-24]. Boyleite definition. Dostupné z WWW: <<http://www.geography-dictionary.org/Boyleite>>.
- [51] BLAKE, A. J., et al. Zinc(II) sulfate tetrahydrate. *Acta Crystallographica Section E: Structure Reports Online*. November 2001, 57, 12, s. 109-111. Dostupný také z WWW: <<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?S1600536801017998>>.
- [52] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Chalcantite. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-959.html>>.
- [53] BACON, G. E.; TITTERTON, D. H. Neutron-diffraction studies of  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  and  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{D}_2\text{O}$ . *Zeitschrift fur Kristallographie*. October 1975, 141, 5-6, s. 330-341. Dostupný také z WWW: <<http://www.oldenbourg-link.com/doi/pdf/10.1524/zkri.1975.141.5-6.330>>.
- [54] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Pentahydrate. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-3153.html>>.
- [55] *Geography Dictionary* [online]. c2008 [cit. 2011-06-24]. Pentahydrate definition. Dostupné z WWW: <<http://www.geography-dictionary.org/pentahydrate>>.
- [56] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Hexahydrate. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-1891.html>>.
- [57] ZALKIN, A.; RUBEN, H.; TEMPLETON, D. H. The crystal structure and hydrogen bonding of magnesium sulfate hexahydrate. *Acta Crystallographica*. March 1964, 17, 3, s. 235-240. Dostupný také z WWW: <<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?a04102>>.
- [58] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Nickelhexahydrate. Dostupné z WWW: <<http://www.mindat.org/min-2889.html>>.
- [59] *Mineralienatlas* [online]. c1999 [cit. 2011-06-24]. Mineralienatlas Lexikon - Nickelhexahydrate. Dostupné z WWW: <<http://www.mineralatlas.eu/lexikon/index.php/MineralData?mineral=Nickelhexahydrate>>.

- [60] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Mohrite. Dostupné z WWW: < <http://www.mindat.org/min-2742.html>>.
- [61] FIGGIS, B. N., et al. The structure of  $(\text{ND}_4)_2\text{Fe}(\text{SO}_4)_2 \cdot 6\text{D}_2\text{O}$  at 4.3 K by neutron diffraction. *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*. June 1989, 45, 6, s. 942-944. Dostupný také z WWW: <<http://scripts.iucr.org/cgi-bin/paper?as0157>>.
- [62] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Picromerite. Dostupné z WWW: < <http://www.mindat.org/min-3206.html>>.
- [63] *Mineralogy Database* [online]. c1993 [cit. 2011-06-24]. Cyanochroite. Dostupné z WWW: < <http://www.mindat.org/min-1200.html>>.
- [64] SCHORN, Stefan, et al. *Mineralienatlas* [online]. c1999 [cit. 2011-06-24]. Dostupné z WWW: <<http://www.mineralienatlas.de/>>.
- [65] PETERSON, R. C. The relationship between Cu content and distortion in the atomic structure, of melanterite from the Richmond mine, Iron Mountain, California. *The Canadian Mineralogist*. 2003, 41, s. 937-949.